Por outro lado temos, dado que os operadores $\vec{S}^2$ e $\vec{L}^2$ comutam com $L_x - i L_y$:

$$\begin{cases} \vec{S}^2 \left\{ (L_x - i L_y)^k A_1 \right\} = (L_x - i L_y)^k \left\{ \vec{S}^2 A_1 \right\} = (L_x - i L_y)^k \left\{ S(S+1) A_1 \right\} = S(S+1) \left\{ (L_x - i L_y)^k A_1 \right\} ; \\ \vec{L}^2 \left\{ (L_x - i L_y)^k A_1 \right\} = (L_x - i L_y)^k \left\{ \vec{L}^2 A_1 \right\} = (L_x - i L_y)^k \left\{ L(L+1) A_1 \right\} = L(L+1) \left\{ (L_x - i L_y)^k A_1 \right\} . \end{cases}$$

Quere dizer, as funções $(L_x - i L_y)^k A_1$ são funções próprias dos quatro operadores S_z, L_z, $\vec{S}^2$, $\vec{L}^2$ com os valores próprios S, $L-k$, $S(S+1)$, $L(L+1)$; são, pois, da forma $\Psi(S, L, M_S, M_L)$ ou, concretizando mais, da forma ${}^1G_{0,1-k}$ (àparte um coeficiente de normalização).

Consideremos agora o estado B_1. Neste estado $\sum_{i=1}^{N} m_{si}$ é máximo. É fácil ver que B_1 é uma função própria de $\vec{S}^2$ e de $\vec{L}^2$; logo B_1 é da forma $\Psi(S\ L\ M_S\ M_L)$; é um estado pertencente ao termo ${}^3F$ (o símbolo F designa $L=3$ e a multiplicidade $2S+1=3$ corresponde a $S=1$); com efeito obtém-se, tal como para A_1:

$$\begin{cases} \vec{S}^2 B_1 = S(S+1) B_1 \\ \vec{L}^2 B_1 = L(L+1) B_1 \end{cases} \qquad \begin{cases} S_z B_1 = S B_1 \\ L_z B_1 = L B_1 \end{cases} \qquad \begin{cases} S = 1 = M_S = \sum_{i=1}^{N} m_{si} \\ L = 3 = M_L = \sum_{i=1}^{N} m_{li} \end{cases}$$

O estado B_1 é pois um estado ${}^3F_{1,3}$.

Êste resultado é válido para tôdas as configurações. Pode demonstrar-se que o estado cujo spin corresponde a $\sum_{i=1}^{N} m_{si}$ máximo e cujo $\sum_{i=1}^{N} m_{li}$ para tais spins também é máximo, é função própria de $\vec{S}^2$ e $\vec{L}^2$ com $S = M_S = \sum_{i=1}^{N} m_{si}$ e $L = M_L = \sum_{i=1}^{N} m_{li}$.

Tal como para $A_1 = {}^1G_{0,1}$ pode-se demonstrar que é

$${}^3F_{1,3-k} = \frac{1}{K} (L_x - i L_y)^k \cdot {}^3F_{1,3},$$

em que K é um factor constante.

Além disso obtém-se:

$$(S_x - iS_y)\ {}^3F_{1,3-k} = \sqrt{(1+1)(1-1+1)}\ {}^3F_{0,3-k} = \sqrt{2} \cdot {}^3F_{0,3-k};$$

$$(S_x - iS_y)^2\ {}^3F_{1,3-k} = \sqrt{2}\,(S_x - iS_y)\ {}^3F_{0,3-k} = \sqrt{2}\sqrt{(1+0)(1-0+1)}\ {}^3F_{-1,3-k} = 2 \cdot {}^3F_{-1,3-k},$$

donde

$$\begin{cases} {}^3F_{0,3-k} = \frac{1}{\sqrt{2}} (S_x - iS_y)\ {}^3F_{1,3-k} \\ {}^3F_{-1,3-k} = \frac{1}{2} (S_x - iS_y)^2\ {}^3F_{1,3-k} \end{cases}$$

ou seja em geral

$$\boxed{{}^3F_{1-k',3-k} = \frac{1}{K'} (S_x - iS_y)^{k'}\ {}^3F_{1,3-k} = \frac{1}{K K'} (L_x - iL_y)^k (S_y - iS_y)^{k'}\ {}^3F_{1,3}.}$$

As funções ${}^1G_{0,4-k}$ e ${}^3F_{1-k',3-k}$ cujo número total é, respectivamente, de $9+3\times 8=30$, representam os 30 estados dos termos ${}^1G$ e ${}^3F$ (1). Cada um dos estados ${}^1G_{0,4-k}$ é uma função linear dos estados de ordem zero com $M_S=0$ e $M_L=4-k$ e cada estado ${}^3F_{1-k',3-k}$ é uma função linear dos estados de ordem zero com $M_S=1-k'$ e $M_L=3-k$. Assim, por exemplo ${}^1G_{0,4}$ é igual a A_1, único estado com $M_L=4$; ${}^1G_{0,3}$ e ${}^3F_{0,3}$ são funções lineares dos dois estados C_1 e C_2, únicos com $M_S=0$ e $M_L=3$; ${}^1G_{0,2}$ e ${}^3F_{0,2}$ são funções lineares de A_2, C_3 e C_4, que são os estados de ordem zero com $M_S=0$ e $M_L=2$.

Note-se que os dois estados ${}^1G_{0,2}$ e ${}^3F_{0,2}$ são funções lineares não de duas, mas de três funções de ordem zero. Isto acarreta consigo uma conseqüência importante. As expressões gerais de ${}^1G_{0,4-k}$ e ${}^3F_{1-k',3-k}$ reduzem-se, no caso de ${}^1G_{0,2}$ e ${}^3F_{0,2}$ a

$$\begin{cases} {}^1G_{0,2}=\dfrac{1}{2\sqrt{7}}\cdot\left\{4\,A_2+\sqrt{6}\,(C_3-C_4)\right\} \\ {}^3F_{0,2}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\cdot\left\{C_3+C_4\right\}; \end{cases}$$

ora bem; estas duas funções, que são normais e ortogonais entre si, são também ortogonais a uma terceira função normal,

$$\varphi=\frac{1}{\sqrt{7}}\cdot\left\{\sqrt{3}\,A_2-\sqrt{2}\,(C_3-C_4)\right\}.$$

Como φ é uma função linear de estados de ordem zero todos com o mesmo $M_S=0$ e o mesmo $M_L=2$, segue-se que é uma função própria de S_z e L_z. Pode-se ainda verificar (directamente) que é função própria de $\vec{S}^2$ e $\vec{L}^2$ com os valores próprios $S=0$ e $L=2$; quere dizer φ é da forma Ψ (S L M_S M_L), ou, melhor, da forma Ψ (S L S L); é um estado ${}^1D_{0,2}$, pois D corresponde a $L=2$ e a multiplicidade $2\,S+1$ é igual a 1 para $S=0$.

Temos pois:

$$\begin{cases} {}^1G_{0,2}=\dfrac{1}{2\sqrt{7}}\left\{4\,A_2+\sqrt{6}\,(C_3-C_4)\right\} \\ {}^3F_{0,2}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{C_3+C_4\right\} \\ {}^1D_{0,2}=\dfrac{1}{\sqrt{7}}\left\{\sqrt{3}\,A_2-\sqrt{2}\,(C_3-C_4)\right\}. \end{cases}$$

Por aplicação do operador $(L_x-i\,L_y)^k$, o estado ${}^1D_{0,2}$ dá-nos todos os estados ${}^1D_{0,2-k}$.

Se prosseguíssemos esta análise, apareciam-nos ainda os estados correspondentes a mais dois termos, ${}^3P$ e ${}^1S$; a ${}^3P$ correspondem 9 estados e a ${}^1S$ um único. O total de estados Ψ (S L M_S M_L) existentes na configuração iguala o de estados de ordem zero.

Note-se que cada estado Ψ (S L M_S M_L) fica bem definido pela configuração electrónica e pelos quatro números quânticos S, L, M_S, M_L. Portanto as funções próprias simultâneas dos quatro operadores $\vec{S}^2$, $\vec{L}^2$, S_z e L_z não são degeneradas quando pertencem à mesma configuração; mas já o são quando pertencem a configurações distintas.

---

(1) Quanto ao significado atribuído à palavra *termo* veja o n.º 17.

16) *As funções* $\Psi(S, L, M_S, M_L)$ *satisfazem à equação* $(H_0 + H_1)\Psi = E\Psi$ *em que* E *é um parâmetro constante.*

Tendo em conta as relações

$$\Delta_i^2 L_{lj} = L_{lj}\Delta_i^2;\ L_{li} V(r_j) = 0;\ (L_{li} + L_{lj})\frac{1}{r_{ij}} = 0;\ \Delta_k^2 \frac{1}{r_{ij}} = 0,$$

fàcilmente demonstráveis em coordenadas rectangulares e para as quais é

$$l = x, y, z;\ i, j, k = 1, 2, \ldots, N;\ \Delta_i^2 = \partial^2/\partial x_i^2 + \partial^2/\partial y_i^2 + \partial^2/\partial z_i^2,$$

e admitindo que $V(r_k)$ satisfaz à relação $\Delta_k^2 V(r_k) = 0$, é fácil demonstrar as relações

$$\vec{L}^2 H_0 = H_0 \vec{L}^2;\ \vec{L}^2 H_1 = H_1 \vec{L}^2;\ L_z H_0 = H_0 L_z;\ L_z H_1 = H_1 L_z;\ H_0 H_1 = H_1 H_0,$$

as quais, associadas a $\vec{L}^2 L_l - L_l \vec{L}^2 = 0$ (veja-se o n.º 12, pág. 62) se exprimem dizendo que os operadores $\vec{L}^2$, L_z, H_0, H_1 comutam dois a dois.

Por outro lado os operadores $\vec{S}^2$ e S_z comutam com os quatro anteriores, pois só actuam sôbre as variáveis spin; além disso comutam entre si (n.º 12, pág. 62).

Quere dizer, os seis operadores $\vec{S}^2, \vec{L}^2, S_z, L_z, H_0, H_1$ comutam dois a dois.

Mas isto significa que existem funções próprias simultâneas dêstes seis operadores $\Psi(S, L, M_S, M_L\ E_0, E_1)$ (veja-se o n.º 11).

Notemos agora que as funções $\Psi(S, L, M_S, M_L)$, atrás consideradas, são combinações lineares de funções de ordem zero tôdas pertencentes à mesma configuração electrónica, e satisfazem por isso à mesma equação

$$H_0 \Psi(S, L, M_S, M_L) = E_0 \Psi(S, L, M_S, M_L)$$

a que satisfaz cada uma das funções de ordem zero que nelas entra; isto é, as funções $\Psi(S, L, M_S, M_L)$ são funções próprias de H_0,

$$\Psi(S, L, M_S, M_L) \equiv \Psi(S, L, M_S, M_L, E_0).$$

As funções $\Psi(S, L, M_S, M_L, E_0, E_1)$ são, em geral, funções lineares das $\Psi(S, L, M_S, M_L, E_0)$ (veja-se o n.º 11). É fácil, porém, demonstrar, por um raciocínio absolutamente idêntico ao do n.º 13, pág. 65, que dêste desenvolvimento só podem fazer parte funções $\Psi(S, L, M_S, M_L, E_0)$ tôdas com o mesmo S, o mesmo L, o mesmo M_S, o mesmo M_L e o mesmo E_0.

Ora E_0 depende da configuração electrónica; e só por um acaso muito extraordinário é que duas configurações diferentes apresentarão o mesmo valor do parâmetro E_0. Isto significa que as funções $\Psi(S, L, M_S, M_L, E_0)$ têm de pertencer tôdas à mesma configuração electrónica.

Mas em cada uma destas há uma única função $\Psi(S, L, M_S, M_L, E_0)$; logo terá necessàriamente de ser (àparte um factor de proporcionalidade de módulo igual a 1):

$$\Psi(S, L, M_S, M_L, E_0, E_1) \equiv \Psi(S, L, M_S, M_L, E_0) \equiv \Psi(S, L, M_S, M_L);$$

quere dizer as funções $\Psi(S, L, M_S, M_L)$ satisfazem a

$$(H_0 + H_1)\Psi(S, L, M_S, M_L) = (E_0 + E_1)\Psi(S, L, M_S, M_L).$$

17) *Recapitulação. Noção de* têrmo espectral *e de* nível energético.

Parece-nos conveniente lançar uma vista de olhos retrospectiva sôbre os resultados obtidos até agora.

O tema que nos propuzemos tratar foi o de indicar como se calcula a energia dum átomo, neutro ou ionizado, não submetido à acção de quaisquer agentes exteriores, como campos eléctricos ou magnéticos, energia radiante, átomos, moléculas, ou partículas de qualquer espécie. Visualizámos por isso o átomo como constituído por um núcleo central com Z cargas eléctricas positivas, em tôrno do qual gravitassem N electrões. Foi para um sistema assim constituído que deduzimos a expressão do operador H da equação de Schrödinger $H\Psi = E\Psi$. Acentuemos que a equação obtida não é a equação rigorosa, mas sim uma simplificação.

O operador H apresentou-se-nos constituído por uma soma de três parcelas (veja-se o final do n.º 2). Aproveitámos êste facto para considerarmos em primeiro lugar uma outra equação, $H_0 \Psi_0 = E_0 \Psi_0$, cujo operador, H_0, era justamente a primeira parcela do hamiltoniano H.

Vimos como se podiam obter soluções desta última equação que fôssem antissimétricas para que fôsse satisfeito o princípio da exclusão de Pauli. E verificámos que havia, neste caso, uma degenerescência muito grande, pois os valores próprios E_0 dependiam exclusivamente dos números quânticos $n_1, l_1, n_2, l_2 \ldots, n_N, l_N$, isto é, da *configuração electrónica.*

Procedemos depois a uma mudança de base das funções que satisfazem a $H_0 \Psi_0 = E_0 \Psi_0$. Obtivemos novas funções-base, do tipo $\Psi(S, L, M_S, M_L)$, que além de satisfazerem a $H_0 \Psi(S, L, M_S, M_L) = E_0 \Psi(S, L, M_S, M_L)$, eram funções próprias dos operadores $\vec{S}^2, \vec{L}^2, S_z, L_z, \frac{1}{2} \sum_{j,k=1, j \neq k}^{N} (l^2/r_{jk})$. Tais funções satisfazem à equação

$$(H_0 + H_1) \Psi(S, L, M_S, M_L) = E(n_1, l_1, n_2, l_2, n_3, \ldots, n_N, l_N, S, L) \Psi(S, L, M_S, M_L)$$

cujo operador é a soma das duas primeiras parcelas, $H_0 + H_1$, do hamiltoniano H. Com o descobrimento destas novas funções-base demos mais um passo na resolução da equação de Schrödinger correspondente ao nosso problema.

Note-se que o valor próprio da energia, $E(n_1, l_1, n_2, l_2, \ldots, n_N, l_N, S, L)$, ainda é independente de M_S e M_L e portanto neste caso ainda há degenerescência. Mas esta é menor, pois E depende de S e de L, ao contrário do que sucedia com E_0: quere dizer, numa configuração electrónica determinada, em vez de haver um valor único da energia E_0, como sucedia quando se não tomavam em consideração as parcelas H_1 e U_S do hamiltoniano H, passa a haver diferentes valores E logo que se toma H_1 em consideração.

Torna-se evidente que êste resultado advém da existência, em H_1, da parcela $\frac{1}{2} \sum_{j,k=1, j \neq k}^{N} (e^2/r_{jk})$ correspondente à energia de interacção electrostática. Podemos, pois, dizer que ao entrarmos nos nossos cálculos com a energia de interacção electrostática, a energia dum átomo numa dada configuração electrónica, que era a mesma para todos os estados pertencentes a essa configuração, se desdobra num certo número de valores diferentes, cada um dêles caracterizando aquilo a que os espectroscopistas chamam um *têrmo espectral.*

Podemos definir *têrmo espectral* como o valor próprio, E, da energia, comum a todos os estados $\Psi(S, L, M_S, M_L)$ com o mesmo S e o mesmo L, derivados do operador $H_0 + H_1$.

Quando passarmos a ter em conta, nos nossos cálculos, a terceira parcela, U_S, do nosso hamiltoniano, correspondente com se sabe à energia de interacção magnética órbita-spin, notaremos que a degenerescência torna a diminuir pelo facto da energia de cada *têrmo* se desdobrar nas energias dos diferentes *níveis* que o átomo possui quando não está submetido à acção dum campo exterior, eléctrico ou magnético. Note-se, porém, que a degenerescência só desaparece

totalmente, isto é, que só passamos a ter valores diferentes da energia para diferentes estados do átomo, quando submetermos êste à acção dum campo magnético exterior (efeito Zeeman).

18) *As funções* $\Psi(SLJM)$. *O acoplamento Russell-Saunders. A equação secular.*

Consideremos agora a última parcela do hamiltoniano,

$$U_S = \frac{1}{2m^2c^2} \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{r_k} \left(\frac{dV}{dr}\right)_{r=r_k} \vec{S}_k \cdot \vec{L}_k .$$

É fácil verificar que U_S não comuta nem com L_z nem com S_z. Isto significa que as funções próprias de U_S não podem ser funções próprias de S_z ou L_z. Portanto as funções $\Psi(S, L, M_S, M_L)$ não podem ser funções próprias do hamiltoniano $H_0 + H_1 + U_S$.

Note-se, porém, que o cálculo dá

$$(L_z U_S - U_S L_z) = \frac{1}{2m^2c^2} \cdot \frac{h}{2\pi i} \cdot \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{r_k} \left(\frac{dV}{dr}\right)_{r=r_k} (S_{xk} L_{yk} - S_{yk} L_{xk}) = -(S_z U_S - U_S S_z)$$

com mais duas equações obtidas desta por permutações circulares. Isto significa que é:

$$\left(\vec{L} + \vec{S}\right) U_S - U_S \left(\vec{L} + \vec{S}\right) = 0 .$$

Resulta daqui que U_S comuta com $L_z + S_z$ e com $\left(\vec{L} + \vec{S}\right)^2$. O mesmo acontece a H_0 e a H_1, pois cada um dêstes dois operadores comuta separadamente com $\vec{L}$ e com $\vec{S}$. Quere dizer o hamiltoniano $H = H_0 + H_1 + U_S$ comuta com $L_z + S_z$ e com $\left(\vec{L} + \vec{S}\right)^2$.

Êste facto leva-nos a admitir a existência duma classe de funções $\Psi(J, M)$ que sejam funções próprias de H, de $\vec{J}^2$ e de J_z (designando por $\vec{J}$ a soma $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$), isto é, tais que seja

$$(H_0 + H_1 + U_S)\, \Psi(J, M) = E_S\, \Psi(J, M) .$$

Não está demonstrado que as funções $\Psi(S L M_S M_L)$ constituam um conjunto completo de funções ortonormais; admitindo, porém, que o constituam, as funções $\Psi(J, M)$ podem-se exprimir como combinações lineares das funções $\Psi(S, L, M_S, M_L)$,

$$\Psi(J, M) = \Sigma\, c\, \Psi(S, L, M_S, M_L) \qquad a)$$

em que os cc representam grandezas constantes.

Estas combinações lineares satisfazem a uma condição. Para determinar esta, notemos em primeiro lugar que $\Psi(J, M)$ é função própria de J_z,

$$J_z\, \Psi(J, M) = M\, \Psi(J, M) . \qquad b)$$

Por outro lado temos o seguinte, por virtude das funções $\Psi(S, L, M_S, M_L)$ serem funções próprias de L_z e de S_z,

$$J_z\, \Sigma\, c\, \Psi(S, L, M_S, M_L) = \Sigma\, c\, J_z\, \Psi(S, L, M_S, M_L) = \Sigma\, c\, (L_z + S_z)\, \Psi(S, L, M_S\, M_L) = \\ = \Sigma\, c\, (M_L + M_S)\, \Psi(S, L, M_S, M_L) . \qquad c)$$

TABELAS TÉCNICAS

PARA

ENGENHARIA CIVIL

Compiladas por Nuno Abrantes e A. Celestino da Costa

Sob a direcção do PROF. VICENTE FERREIRA

Insere: TABELAS MATEMÁTICAS; TABELAS COM CARACTERÍSTICAS MECÂNICAS DE DIVERSOS MATERIAIS; PERFIS LAMINADOS, SIMPLES E COMPOSTOS; TABELAS PARA O CÁLCULO DE PEÇAS COMPRIDAS COMPRIMIDAS (FÓRMULAS DE RANKINE, EULER E TETMAYER, VIERENDEEL); TABELAS DE BETÃO ARMADO; ESGOTOS, ETC.

Á venda na redacção da TÉCNICA

Preço 45$00 Para assinantes 40$00

Tabelas

para o Cálculo do Betão Armado

Elaboradas em completo acôrdo com o Regulamento Português do Betão Armado

PELO ENGENHEIRO FERNANDO VASCO COSTA

A' venda na Redacção da "Técnica"

Preço 35$00 Desconto de 10 % aos assinantes

OFICINAS E LABORATÓRIOS

DO

INSTITUTO SUPERIOR TÉCNICO

As oficinas pedagógicas do Instituto Superior Técnico, de CARPINTARIA DE MOLDE, de INSTRUMENTOS DE PRECISÃO e de ELECTROTÉCNICA, fornecem todo o género de material escolar e de demonstração para o ensino técnico. Nos laboratórios de QUÍMICA ANALÍTICA, FÍSICA INDUSTRIAL E DE MINERALOGIA executam-se análises para o público

Para quaisquer informações, dirigir-se ao secretário da comissão executiva

As equações a), b) e c) dão

$$M \Sigma c \Psi (S, L, M_S, M_L) = \Sigma c (M_L + M_S) \Psi (S, L, M_S, M_L),$$

ou seja

$$\Sigma c \left\{ 1 - \frac{M_L + M_S}{M} \right\} \Psi (S, L, M_S, M_L) = 0.$$

Como as funções $\Psi (S, L, M_S, M_L)$ são linearmente independentes, teremos necessàriamente $1 - (M_L + M_S)/M = 0$ ou $M_L + M_S = M$.

Quere dizer, se o desenvolvimento é possível, em cada função $\Psi (J, M)$ entram sòmente funções $\Psi (S, L, M_S, M_L)$ para cada uma das quais é $M_S + M_L = M$.

Nada impede que no desenvolvimento de $\Psi (J, M)$ entrem funções $\Psi (S, L, M_S, M_L)$ correspondentes a diferentes valores de S e L. Consideremos, porém, um tipo de funções, $\Psi' (J, M)$, que sejam combinações lineares de funções $\Psi (S, L, M_S, M_L)$ tôdas com o mesmo S e o mesmo L. Para estas funções é

$$\vec{S}^2 \Psi' (J, M) = \Sigma c \vec{S}^2 \Psi (S, L, M_S, M_L) = \Sigma c S (S + 1) \Psi (S, L, M_S, M_L) =$$
$$= S (S + 1) \Sigma c \Psi (S, L, M_S, M_L) = S (S + 1) \Psi' (J, M);$$

as funções $\Psi' (J, M)$ são, pois, funções próprias de $\vec{S}^2$. Da mesma forma se obteria

$$\vec{L}^2 \Psi' (J, M) = L (L + 1) \Psi' (J, M).$$

Como se vê, as funções $\Psi' (J, M)$ são funções próprias dos quatro operadores $\vec{S}^2$, $\vec{L}^2$, $(\vec{L} + \vec{S})^2$, $L_z + S_z$. Representa-las-emos, por isso, por $\Psi (S, L, J, M)$.

Note-se que as funções $\Psi (S, L, J, M)$ não são funções próprias de $H_0 + H_1 + U_S$; com efeito, se o fossem o operador $H_0 + H_1 + U_S$ teria de comutar com $\vec{L}^2$ e com $\vec{S}^2$; e como $H_0 + H_1$ comuta com estes operadores, U_S teria também de comutar, o que não se verifica. As funções $\Psi (S, L, J, M)$, combinações lineares de funções $\Psi (S\ L\ M_S\ M_L)$ tôdas com o mesmo S e mesmo L, não são, pois, funções próprias de $H_0 + H_1 + U_S$.

É importante, porém, o caso em que a energia correspondente a U_S é pequena comparada com a que corresponde a $H_0 + H_1$. Neste caso as funções $\Psi (S\ L\ J\ M)$ satisfazem *aproximadamente* (mas não rigorosamente) à equação $(H_0 + H_1 + U_S)\ \Psi = E\ \Psi$ e os vectores $\vec{S}$ e $\vec{L}$ são aproximadamente quantizados; diz-se então que existe *acoplamento L S* ou *acoplamento Russell-Saunders.*

As funções próprias, $\Psi (J, M)$, do operador $H_0 + H_1 + U_S$ (daqui em diante designado por H) são, porém, representáveis por combinações lineares das funções $\Psi (S, L, J, M)$, caso estas constituam um conjunto completo de funções ortonormais. Isto é, teremos

$$\Psi (J, M) = \sum_i c_i \Psi (S_i, L_i, J, M) \qquad a')$$

em que os c_i representam constantes. Da mesma maneira teremos para a função $H \Psi (S_i, L_i, J, M)$:

$$H \Psi (S_i, L_i, J, M) = \sum_j H_{ij} \Psi (S_j, L_j, J, M). \qquad b')$$

Os coeficientes constantes H_{ij} que figuram na equação b') são calculáveis em função dos $\Psi (S, L, J, M)$; com efeito multipliquemos ambos os membros de b') por $\{ \Psi (S_k, L_k, J, M) \}^*$

e por $d\tau = dx_1\, dy_1\, dz_1\, dx_2 \ldots dy_N\, dz_N$, integremos em ordem a $x_1, y_1, \ldots, z_N$ e somemos em ordem aos spins $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_N$; obtém-se

$$\sum_{\text{spins}} \int \{\Psi(S_k, L_k, J, M\}^* H \Psi(S_i, L_i, J, M)\, d\tau =$$

$$= \sum_j H_{ij} \sum_{\text{spins}} \int \{\Psi(S_k, L_k, J, M)\}^* \Psi(S_j, L_j, J, M)\, d\tau . \qquad \text{c)}$$

Porém, as funções $\Psi(S, L, J, M)$ são ortonormais; isto significa que é

$$\sum_{\text{spins}} \int \{\Psi(S_k, L_k, J, M)\}^* \Psi(S_j, L_j, J, M)\, d\tau = \begin{cases} 1 & k = j \\ 0 & k \neq j \end{cases};$$

êste facto faz com que o segundo membro de c) seja igual a H_{ik}, isto é, que seja

$$H_{ik} = \sum_{\text{spins}} \int \{\Psi(S_k, L_k, J, M)\}^* H \Psi(S_i, L_i, J, M)\, d\tau ,$$

quere dizer, H_{ik} representa o *elemento de matriz* do operador H em relação às funções $\Psi(S_i, L_i, J, M)$ e $\Psi(S_k, L_k, J, M)$ [1].

Os parâmetros J e M são sempre os mesmos em tôdas as funções $\Psi(S, L, J, M)$ que figuram nos desenvolvimentos a') e b'), como se pode demonstrar repetindo o raciocínio feito neste mesmo número para o desenvolvimento de $\Psi(J, M)$ em função dos $\Psi(S, L, M_S, M_L)$.

Como $\Psi(J, M)$ é função própria de H temos, designando por E o valor próprio de H:

$$H \Psi(J, M) = E \Psi(J, M);$$

e substituindo $\Psi(J, M)$ pelo seu valor:

$$H \Psi(J, M) = H \sum_i c_i \Psi(S_i, L_i, J, M) = \sum_i c_i H \Psi(S_i, L_i, J, M) = \sum_i c_i \sum_j H_{ij} \Psi(S_j L_j J, M)$$

donde se segue que é

$$\sum_i c_i \sum_j H_{ij} \Psi(S_j, L_j, J, M) = E \sum_i c_i \Psi(S_i, L_i, J, M).$$

Pondo em factor comum as funções $\Psi(S_j, L_j, J, M)$, obtém-se

$$\sum_j \left\{ \sum_i c_i H_{ij} - E c_j \right\} \Psi(S_j, L_j, J, M) = 0;$$

ora as funções $\Psi(S, L, J, M)$ são linearmente independentes; portanto será necessàriamente

$$\sum_i c_i H_{ij} - E c_j = 0 \qquad j = 1, 2, \ldots, n;$$

---

[1] Comparando a expressão de H_{ik} com a do elemento de matriz apresentado a pág. 50 verifica-se que em H_{ik} há a mais o $\sum_{\text{spins}}$; êste $\sum_{\text{spins}}$ aparece em todos os elementos derivados de funções que dependem de variáveis a que só se pode atribuir um número finito de valores numéricos, como sucede com as variáveis spin.

ou seja, desenvolvendo

$$H_{1j}c_1 + H_{2j}c_2 + \ldots + (H_{jj} - E)c_j + \ldots + H_{nj}c_n = 0 \qquad j = 1, 2, \ldots, n;$$

para êste sistema admita soluções c_i não nulas, teremos de ter

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{21} & \ldots\ldots\ldots & H_{n1} \\ H_{12} & H_{22} - E & \ldots\ldots\ldots & H_{n2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ H_{1n} & H_{2n} & \ldots\ldots\ldots & H_{nn} - E \end{vmatrix} = 0. \qquad \text{d)}$$

Os valores próprios, E, satisfazem portanto à equação d), a que se chama *equação secular*.

Esta equação é relativamente simples, pois os H_{ij} são nulos para pares de funções $\Psi(S, L, J, M)$ correspondentes a valores diferentes de J ou de M.

Os elementos não diagonais, H_{ij} com $i \neq j$, quási sempre dependem só da parcela U_S do hamiltoniano H.

19) *O acoplamento JJ.*

Consideremos as funções

$$\phi(x_k, y_k, z_k, \sigma_k \mid n_k, l_k, j_k, m_k) = \phi(x_k, y_k, z_k, \sigma_k \mid n_k, l_k, l_k \pm {}^1/_2, m_k) =$$
$$= \sqrt{\frac{l_k \pm m_k + {}^1/_2}{2\, l_k + 1}}\, \Psi(x_k, y_k, z_k, \sigma_k \mid n_k, l_k, m_k - {}^1/_2, {}^1/_2) \pm$$
$$\pm \sqrt{\frac{l_k \mp m_k + {}^1/_2}{2\, l_k + 1}} \cdot \Psi(x_k, y_k, z_k, \sigma_k \mid n_k, l_k, m_k + {}^1/_2, -{}^1/_2)$$

para $l_k > 0$; e

$$\phi(x_k, y_k, z_k, \sigma_k \mid n_k, s, {}^1/_2, \pm {}^1/_2) = \Psi(x_k, y_k, z_k, \sigma_k \mid n_k, s, 0, \pm {}^1/_2)$$

para $l = 0$ (electrão s).

Nestas expressões as funções Ψ são as que encontrámos precedentemente sob a forma abreviada $\Psi(x_k \mid n_k)$. Os números quânticos magnéticos, m_{lk}, é que são iguais ou a $m_k - {}^1/_2$ ou a $m_k + {}^1/_2$, em que m_k designa uma constante.

As funções ϕ são funções lineares dos Ψ Ψ com o mesmo n, o mesmo l e satisfazendo à condição $m_{lk} + m_{sk} = m_k =$ constante. Representêmo-las abreviadamente por $\phi(x_k \mid n_k)$.

No caso especial de haver um só electrão ($N = 1$) isto é, de se tratar dum átomo análogo ao do hidrogénio, as funções ϕ são muito aproximadamente (mas não rigorosamente) as funções próprias da energia de interacção órbita-spin, $U_S = ({}^1/_2\, m^2\, c^2)\,(1/r)\,(\partial V/\partial r)\,.\,\vec{S}\,\vec{L}$, isto é, as funções ϕ satisfazem muito aproximadamente à condição

$$U_S\, \phi(x_k \mid n_k) = K\, \phi(x_k \mid n_k)$$

em que K representa um valor numérico [1].

---

[1] A demonstração pode ver-se, por exemplo, em Condon e Shortley, «The theory of atomic spectra», pág. 121 e seg.

O produto $\phi(x_1 \mid n_1) \ldots \phi(x_N \mid n_N)$ satisfaz à equação $H_0 \Psi_0 = E_0 \Psi_0$; com efeito para que êste produto satisfaça basta que $\phi(x_k \mid n_k)$ satisfaça à equação b) da pág. 52. Ora $\phi(x_k \mid n_k)$ é uma combinação linear de $\Psi(n_k, l_k, m_k - 1/2, 1/2)$ e $\Psi(n_k, l_k, m_k + 1/2, -1/2)$; e estas funções satisfazem a b), ambas com o mesmo valor próprio $E(n_k, l_k)$; logo qualquer combinação linear dos dois Ψ Ψ e portanto $\phi(x_k \mid n_k)$ satisfazem a b); e o produto $\phi(x_k \mid n_k) \ldots \phi(x_N \mid n_N)$ satisfaz a $H_0 \Psi_0 = E_0 \Psi_0$ com o valor próprio $\sum_{k=1}^{N} E(n_k, l_k)$.

Apliquemos agora ao nosso produto $\phi(x_1 \mid n_1) \ldots \phi(x_N \mid n_N)$ o antissimetrizador $G = \frac{1}{N!} \sum_{\text{perm}} (-1)^p P$, usado a pág. 56. O produto transforma-se então numa função antissimétrica, B_0, que tem uma forma exactamente igual à de A_0 (pág. 56) ou seja a forma de determinante. As funções B_0 satisfazem a $H_0 B_0 = \left(\sum_{k=1}^{N} E(n_k, l_k)\right) B_0$, isto é, são funções próprias de H_0 com o valor próprio $\sum_{k=1}^{N} E(n_k, l_k)$, tal qual como acontecia com as funções A_0. Êste facto não deve causar admiração e significa simplesmente, dada a degenerescência já encontrada no caso da equação $H_0 \Psi_0 = E_0 \Psi_0$, que tanto as funções A_0 como as B_0 pertencem à multiplicidade linear de funções próprias de H_0 com o valor próprio $\sum_{k=1}^{N} E(n_k\ l_k)$.

Notemos agora que as funções B_0 são funções próprias da componente J_z do momento angular total do átomo,

$$\vec{J} = \sum_{k=1}^{N} \left(\vec{L}_k + \vec{S}_k\right) .$$

Com efeito temos:

$$J_z B_0 = \frac{1}{N!} \sum_{\text{perm.}} (-1)^p J_z \left\{\phi(x_{z1} \mid n_1) \ldots \phi(x_{zN} \mid n_N)\right\} \quad ;$$

por outro lado é:

$$J_z \left\{\phi(x_{z1} \mid n_1) \ldots \phi(x_{zN} \mid n_N)\right\} = \sum_{i=1}^{N} \left\{(L_{iz} + S_{iz}) \left(\phi(x_{z1} \mid n_1) \ldots \phi(x_{zN} \mid n_N)\right)\right\} .$$

Recordemos que $\phi(x_{zk} \mid n_k)$ ou é igual a $\Psi(x_{zk} \mid n_k)$ (caso $l = 0$) ou é uma combinação linear de funções Ψ das variáveis x_{zk}, y_{zk}, z_{zk}, σ_{zk}. Por isso é:

$$(L_{iz} + S_{iz}) \left\{\phi(x_{z1} \mid n_1) \ldots \phi(x_{zN} \mid n_N)\right\} = \phi(x_{z1} \mid n_1) \ldots \left\{(L_{iz} + S_{iz}) \phi(x_i \mid n)\right\} \ldots \phi(x_{zN} \mid n_N) \quad .$$

Manifestamente é $\sum_{i=1}^{N} (L_{iz} + S_{iz}) = \sum_{i=1}^{N} (L_{ziz} + S_{ziz})$, pois a soma não varia pelo facto de se permutarem as parcelas. Por isso substituïremos a parcela $L_{iz} + S_{iz}$ por $L_{ziz} + S_{ziz}$. Temos, escrevendo com detalhe os números quânticos (no caso $l_i > 0$):

$$(L_{ziz} + S_{ziz}) \phi(x_{zi} \mid n_i) = (L_{ziz} + S_{ziz}) \left\{\sqrt{\frac{l_i \pm m_i + 1/2}{2 l_i + 1}} \Psi(x_{zi} \mid n_i, l_i, m_i - 1/2, 1/2) \pm\right.$$

$$\left. \pm \sqrt{\frac{l_i \mp m_i + 1/2}{2 l_i + 1}} \Psi(x_{zi} \mid n_i, l_i, m_i + 1/2, -1/2)\right\} =$$

$$= \left\{(m_i - 1/2) + 1/2\right\} \sqrt{\frac{l_i \pm m_i + 1/2}{2 l_i + 1}} \Psi(x_{zi} \mid n_i, l_i, m_i - 1/2, 1/2) \pm$$

$$\pm\left\{(m_i + {}^1/_2) - {}^1/_2\right\}\sqrt{\frac{l_i \mp m_i + {}^1/_2}{2\,l_i + 1}}\,\Psi\,(x_{zi}\,|\,n_i\,,\,l_i\,,\,m_i + {}^1/_2\,,\,-{}^1/_2) =$$

$$= m_i\left\{\sqrt{\frac{l_i \pm m_i + {}^1/_2}{2\,l_i + 1}}\,\Psi\,(x_{zi}\,|\,n_i\,,\,l_i\,,\,m_i - {}^1/_2\,,\,{}^1/_2) \pm\right.$$

$$\left.\pm\sqrt{\frac{l_i \mp m_i + {}^1/_2}{2\,l_i + 1}}\,\Psi\,(x_{zi}\,|\,n_i\,,\,l_i\,,\,m_i + {}^1/_2\,,\,-{}^1/_2)\right\} = m_i\;\phi\,(x_{zi}\,|\,n_i)\,.$$

Obtém-se ainda o mesmo resultado quando fôr $l = 0$; quere dizer,

$$J_z\left\{\phi\,(x_{z1}\,|\,n_1)\,\ldots\,\phi\,(x_{zN}\,|\,n_N)\right\} = \left(\sum_{i=1}^{N} m_i\right)\phi\,(x_{z1}\,|\,n_1)\ldots\phi\,(x_{zN}\,|\,n_N)\,;$$

logo

$$J_z\,B_0 = \left(\sum_{i=1}^{N} m_i\right)\cdot\frac{1}{N\,!}\sum_{\text{permut}}(-1)^p\left\{\phi\,(x_{z1}\,|\,n_1)\ldots\phi\,(x_{zN}\,|\,n_N)\right\} = \left(\sum_{i=1}^{N} m_i\right).\,B_0\,.$$

Quere dizer, as funções B_0 são funções próprias de J_z com o valor próprio $M = \sum_{i=1}^{N} m_i$.

As funções B_0 gozam ainda duma outra propriedade importante, a de serem muito aproximadamente as funções próprias do operador U_S correspondente aos spins. Em compensação não são funções próprias da energia de interacção electrostática $Q = \sum_{\substack{i,j=1\\ i\neq j}}^{N} e^2/r_{ij}$.

Para verificarmos que as funções B_0 são funções próprias de

$$U_S = (1/2\,m^2\,c^2)\sum_{i=1}^{N}(1/r_i)\,(\partial\,V/\partial\,r)_{r=r_i}\,.\,\vec{S}_i\,.\,\vec{L}_i\,,$$

consideremos uma função determinada, B_{0k}, e vejamos o que é $U_S\,B_{0k}$. Admitindo que as funções B_0 constituem um conjunto ortonormal e completo, teremos

$$U_S\;B_{0k} = \sum_{l} U_{Skl}\,B_{0l}$$

em que U_{Skl} representa valorés numéricos constantes, os elementos de matriz de U_S em relação aos B_0,

$$U_{Skl} = \sum_{\text{spins}}\int B_{0l}^{*}\,(U_S\;B_{0k})\,dx_1\,dy_1\ldots dz_N.$$

Como mais tarde veremos [1], os elementos de matriz dum operador da forma $\sum_{i=1}^{N} f\,(x_i,\,y_i,\,z_i,\,\sigma_i)$ só são diferentes de zero quando fôr $B_{0k} = B_{0l}$ ou então quando as funções B_{0k} e B_{0l} só diferirem num único conjunto de números quânticos, isto é, quando fôr

$$n_{1k} = n_{1l}\,;\;n_{2k}\,n_{2l}\,;\;\ldots\,;\;n_{i-1,k} = n_{i-1,l}\,;\;n_{i,k} \neq n_{i,l}\,;\;n_{i+1,k} = n_{i+1,l}\,;\;\ldots\,;\;n_{N,k} = n_{N,l}\,;$$

como sempre, designamos por n_{jk} o conjunto de números quânticos n_{jk}, l_{jk}, m_{ljk}, m_{sjk}. Além disso é, para $k \neq l$,

$$U_{Skl} = \sum_{\text{spins}}\int B_{0l}^{*}\,(U_S\;B_{0k})\,dx_1\ldots dz_N = \sum_{\sigma k,\sigma l}\int\phi\,(x_l\,|\,n_l)\,.\,(1/2\;m^2\,c^2)\,\frac{1}{r_k}\left(\frac{\partial V}{\partial\,r}\right)_{r=r_k}\vec{S}_k\,.\,\vec{L}_k\,.\,\phi\,(x_k\,|\,n_k)\,.$$

---

[1] Veja-se o n.º 20.

Mas nós vimos atrás que é muito aproximadamente, para um só electrão

$$U_S \Phi(x_k \mid n_k) = (1/2m^2 c^2) \frac{1}{r_k} \left(\frac{\partial V}{\partial r}\right)_{r=r_k} . \vec{S}_k . \vec{L}_k \phi(x_k \mid n_k) = K_k \phi(x_k \mid n_k);$$

isto é,

$$U_{S\,kl} = K_k \sum_{\sigma_k, \sigma_l} \int \phi(x_l \mid n_l)^* \phi(x_k \mid n_k) .$$

Ora as funções ϕ são orto-normais; logo o factor de K_k é nulo para $k \neq l$ e igual à unidade para $k = l$; temos pois

$$U_{S\,kl} = K_k \, \delta(k, l)$$

em que $\delta(k, l)$ é o símbolo de Kronecker.

Portanto, no desenvolvimento de $U_S B_{0k}$ os coeficientes são todos nulos com excepção do de B_{0k}; temos pois

$$U_S B_{0k} = K_k B_{0k} ,$$

isto é, as funções B_0 são funções próprias de U_S.

O cálculo dá para valor do parâmetro K

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{j_i(j_i+1) - l_i(l_i+1) - s_i(s_i+1)}{2} \zeta_{ni\,li} ,$$

em que é

$$\zeta_{ni\,li} = (h/2\pi)^2 \int_0^\infty R^2(n_i\, l_i)\, \xi(r)\, dr \quad \text{e} \quad \xi(r) = (1/2m^2 c^2)(1/r)(\partial V/\partial r) .$$

Nestas expressões $R(n_i\, l_i)$ é a função de r apresentada na pág. 54.

As funções B_0 têm importância no caso em que a energia de interacção electrostática é negligível comparada com a energia de interacção órbita-spin. Quando isso acontece as funções B_0 satisfazem muito aproximadamente à equação de Schrödinger, que então se reduz a $(H_0 + U_S)\, \Psi = E\, \Psi$. O parâmetro E é igual à soma de $\sum_{i=1}^{N} E(n_i, l_i)$ com $\sum_{i=1}^{N} \xi_{ni\,li} \frac{j_i(j_i+1) - l_i(l_i+1) - s_i(s_i+1)}{2}$ e dá-nos aproximadamente a energia do átomo

Os momentos angulares orbital, $\vec{l}_i$ e spin, $\vec{s}_i$ do electrão *i* $(i = 1, 2, \ldots, N)$, compõem-se vectorialmente numa resultante quantizada, $\vec{j}_i$. Efectuando combinações lineares com as funções B_0 consegue-se, por um processo análogo ao exposto para as funções A_0, obter funções para as quais o vector resultante, $\vec{J}$, dos N vectores $\vec{j}_i$, também é quantizado, isto é, combinações lineares que sejam funções próprias do quadrado do vector $\vec{J}$. Sempre que num átomo a energia de interacção electrostática é negligível, diz-se que se dá a associação de vectores do tipo JJ ou, empregando a locução vulgar, diz-se que se dá o *acoplamento JJ*.

20) *Os elementos de matriz das energias de interacção electrostática e órbita-spin.*

Os valores possíveis da energia do nosso sistema atómico são as raízes da *equação secular*, apresentada no n.º 18 sob a forma dum determinante (equação *d*).

Para escrever esta equação é necessário calcular os *elementos de matriz* H_{ij} do hamiltoniano H. Para que a equação venha o mais simples possível é costume usar no cálculo dêstes

elementos as funções próprias, $\Psi(S, L, J, M)$, dos quatro operadores $\vec{S}^2$, $\vec{L}^2$, $\vec{J}^2$, J_z ($\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$).

As funções $\Psi(S, L, J, M)$ são funções lineares de funções $\Psi(S, L, M_S, M_L)$ tôdas com o mesmo S, o mesmo L e com $M_S + M_L = M$. Estes desenvolvimentos lineares obtêm-se por aplicação sucessiva dos operadores $J_x - i\,J_y$ e J_z; os coeficientes respectivos foram calculados por diversos autores para os casos mais importantes na prática, e os seus valores encontram-se coligidos no livro de Condon e Shortley, The theory of atomic spectra, págs. 76 e 77.

Conhecidos estes desenvolvimentos, exprimem-se os elementos de matriz H_{ij} em função (linear) dos elementos de matriz do operador H em relação às funções $\Psi(S, L, M_S, M_L)$, H'_{ij}.

Mas as funções $\Psi(S, L, M_S, M_L)$ são funções lineares das funções de ordem zero, A_0 (pág. 56); estas funções lineares obtêm-se por aplicação sucessiva dos operadores $(L_x - i\,L_y)$ ou $(S_k - i\,S_y)$ às funções de ordem zero, com Σm_l máximo e Σm_s também máximo e procurando funções ortogonais às funções já obtidas.

Expressas as funções de $\Psi(S, L, M_S, M_L)$ em função das funções A_0, exprimem-se os elementos H'_{ij} (e portanto os H_{ij}) em função (também linear) dos elementos de matriz H''_{ij} do operador H em relação às funções A_0. Vemos assim, que o cálculo dos elementos H_{ij} que aparecem na equação secular se reduz ao cálculo dos elementos H''_{ij} em relação às funções de ordem zero e ao estabelecimento das relações entre os H_{ij} e os H''_{ij} por intermédio das relações lineares existentes entre as $\Psi(S, L, J, M)$ e as $\Psi(S, L, M_S, M_L)$, bem como entre estas e as funções de ordem zero.

O cálculo dos elementos de matriz, H''_{ij}, em relação às funções de ordem zero, parece à primeira vista duma dificuldade insuperável. Com efeito é

$$H''_{ij} = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} \int A^*_{0j} \left(H A_{0i} \right) dx_1\, dy_1 \dots dy_N\, dz_N$$

e as funções A_0 dependem das $4N$ variáves $x_1, y_1, z_1, \sigma_1, x_2, \dots, z_N, \sigma_N$; para o cobalto, cujo número atónico não é muito elevado, já o número de variáveis é de $4 \times 27 = 108$.

Felizmente dá-se uma circunstância que favorece extraordinàriamente o cálculo dos H''_{ij}. As energias de interacção órbita-spin e eléctrostática são respectivamente das formas

$$\sum_{i=1}^{N} f(x_i, y_i, z_i, \sigma_i) \quad \text{e} \quad \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N} g(x_i, y_i, z_i, x_j, y_j, z_j).$$

Ora demonstra-se fàcilmente que a expressão

$$\sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} \int A^*_{0j} \left(\sum_{i=1}^{N} f_i \right) A_{0i}\, d\tau$$

só é diferente de zero, ou quando fôr $i = j$, ou quando A_{0i} e A_{0j} só diferirem num único conjunto de números quânticos, isto é, quando os N conjuntos de números quânticos de A_{0i}, n_{ik}, l_{ik}, m_{lik}, m_{sik}, $k = 1, 2, \dots, N$, aparecerem *todos* em A_{0j}, com a excepção dum único, que não aparece. Êste facto é uma conseqüência da ortogonalidade das funções $\Psi(x_k \mid n_0)$ que entram na expressão dos A_0 (veja-se a pág. 56) e conduz às expressões seguintes, já muito mais simples por só dependerem das coordenadas dum único eléctrão,

$$\sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} \int A^*_{0j} \left(\sum_{i=1}^{N} f_i \right) A_{0i}\, d\tau = \begin{cases} \pm \sum_{\sigma_k} \int \Psi(x_k \mid n_{jk''})^* f_k\, \Psi(x_k \mid n_{ik'})\, d\tau_k & i \neq j \\ \sum_{k=1}^{N} \sum_{\sigma_k} \int \Psi(x_k \mid n_{jk'})^* f_k\, \Psi(x_k \mid n_{ik'})\, d\tau_k & i = j \end{cases}.$$

Estas expressões obtêm-se substituindo os A_0 pelos seus valores em função dos $\Psi(x_t | n_u)$. O caso $i = j$ corresponde a $A_{0i} = A_{0j}$; o outro corresponde a duas funções A_{0i} e A_{0j} que só diferem num único conjunto de números quânticos, $n_{ik'} \neq n_{jk''}$.

A expressão $\sum_{\sigma_k} \int \Psi(x_k \mid n_{jk''}) f_k \Psi(x_k \mid n_{ik'}) \, d\tau_k$ obtém-se fàcilmente. Temos

$$U_S = \sum_{k=1}^{N} f_k \, ; \; f_k = \xi(r_k) \, . \, \vec{S_k} \, . \, \vec{L_k} \, ; \; \xi(r_k) = (1/2 \, m^2 c^2) \, (1/r_k) \, (\partial V/\partial r)_{r=r_k} \, .$$

Utilizando as coordenadas polares, a expressão a calcular toma a forma [1] (omitindo os indices k' e k'')

$$\sum_{\sigma_k} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} R(r_k \mid n_j, l_j) \, \Theta(\theta_k \mid l_j, m_{lj}) \, \Phi(\phi_k \mid m_{lj})^* \, \delta(\sigma_k, m_{sj}) \, . \, \xi(r_k) \, . \, \vec{S_k} \, . \, \vec{L_k} \, .$$

$$. \, R(r_k \mid n_i, l_i) \, \Theta(\theta_k \mid l_i, m_{li}) \, \Phi(\phi_k \mid m_{li}) \, \delta(\sigma_k, m_{si}) \, dr_k \, \text{sen} \, \theta_k \, d\theta_k \, d\phi_k =$$

$$= \int_0^\infty R(r_k \mid n_j, l_j) \, \xi(r_k) \, R(r_k \mid n_i, l_i) \, . \, \Big\{ \sum_{\sigma_k} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \Theta(\theta_k \mid l_j, m_{lj}) \, \Phi(\phi_k \mid m_{lj})^* \, \delta(\sigma_k, m_{sj}) \, \vec{S_k} \, . \, \vec{L_k} \, .$$

$$\Theta(\theta_k \mid l_i, m_{li}) \, \Phi(\phi_k \mid m_{li}) \, \delta(\sigma_k, m_{si}) \, \text{sen} \, \theta_k \, d\theta_k \, d\phi_k \Big\} .$$

Pode verificar-se que a expressão entre colchetes é justamente o elemento de matriz do operador $\vec{S_k} \, . \, \vec{L_k}$ em ordem às funções $\Psi(x_t \mid n_u)$. O cálculo dá para valor dêste elemento [2]

$$\delta(l_i, l_j) \, . \, \delta(m_{li} + m_{si}, m_{lj} + m_{sj}) \, . \, \Big\{ m_{li} \, m_{si} \, \delta(m_{si}, m_{sj}) +$$

$$+ \frac{1}{2} \delta(m_{si}, m_{sj} \pm 1) \sqrt{(l - m + 1/2)(l + m + 1/2)} \Big\} \, ;$$

nesta expressão designou-se por l a grandeza $l_i = l_j$ e por m a grandeza $m_{li} + m_{si} = m_{lj} + m_{sj}$.

Substituindo na expressão a calcular obtém-se, desprezando, pela sua escassa influência no resultado final, os elementos $\int_0^\infty R(r_k \mid n_j, l_j) \, \xi(r_k) \, R(r_k \mid n_i, l_i) \, dr_k$ para os quais é $i \neq j$:

$$\sum_{\sigma_k} \int \Psi(x_k \mid n_j)^* \, f_k \, \Psi(x_k \mid n_i) \, d\tau_k = \delta(n_i \, l_i, n_j \, l_j) \, \delta(m_{li} + m_{si}, m_{lj} + m_{sj}) \, .$$

$$. \, \Big\{ m_{li} \, m_{si} \, \delta(m_{si}, m_{sj}) + \frac{1}{2} \delta(m_{si}, m_{sj} \pm 1) \sqrt{(l - m + 1/2)(l + m + 1/2)} \Big\} \, . \, \zeta_{nl}$$

em que é $\zeta_{nl} = \int_0^\infty \xi(r) \, R^2(r \mid n, l) \, dr$, tal como no n.º 19.

O valor dos elementos de matriz do operador U_S é, pois, o seguinte:

1) Caso $i = j$:

$$H(U_S)''_{ii} = \sum_{\sigma_1, \ldots, \sigma_N} \int A_{0i}^* (U_S \, A_{0i}) \, d\tau = \sum_{k=1}^{N} m_{lik} \, m_{sik} \, \zeta_{nik \, lik} \, .$$

---

(1) Veja-se a pág. 54.

(2) Veja-se Condon e Shortley, op. cit., pág. 59.

2) Caso em que as funções A_{0i} e A_{0j} apresentam $N-1$ conjuntos de números quânticos iguais, mas diferem em que ao conjunto n_{ik}, l_{ik}, m_{lik}, m_{sik} de A_{0i} corresponde um conjunto diferente, $n_{jk'}$, $l_{jk'}$, $m_{ljk'}$, $m_{sjk'}$, em A_{0j}.

Então é

$$H\,(U_S)''_{ij} = (-1)^p\, \delta\,(n_{ik}\, l_{ik},\ n_{jk'}\, l_{jk'})\,.\ \delta\,(m_{lik} + m_{sik},\ m_{ljk'} + m_{sjk'})\,.\ \delta\,(m_{sik},\ m_{sjk'} \pm 1)\,.$$

$$.\ \frac{1}{2}\sqrt{(l - m + {}^1/_2)\,(l + m + {}^1/_2)}\,.\ \zeta_{n_{ik}\, l_{ik}}$$

onde, como precedentemente, é $l = l_{ik} = l_{jk'}$ e $m = m_{lik} + m_{sik} = m_{ljk'} + m_{sjk'}$; p designa o número de trocas que é necessário efectuar entre as linhas de A_{0j} (escrita sob a forma de determinante, veja-se a pág. 56) para que as linhas k e k' passem para o lugar uma da outra.

3) Em todos os outros casos é $H''_{ij} = 0$.

Tratemos agora da energia de interacção electrostática.

O operador correspondente a esta energia tem a forma

$$Q = \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N} q\,(i,j)\,;\ q\,(i,j) = e^2/r_{ij}\,;$$

r_{ij} representa a distância entre os dois electrões de coordenadas r_i, θ_i, ϕ_i, σ_i e r_j, θ_j, ϕ_j, σ_j.

Demonstra-se que o elemento de matriz

$$\sum_{\sigma_1, \ldots, \sigma_N} \int A_{0j}^{*}\,(G\,A_{0i})\,d\,\tau$$

em que é $G = \sum_{\substack{i',j'=1 \\ i' \neq j'}}^{N} g\,(i',j')$ e $g\,(i',j')$ uma função exclusiva das coordenadas dos electrões i' e j' é nulo sempre que as duas funções A_{0i} e A_{0j} diferirem uma da outra em mais do que dois conjuntos de números quânticos.

Tal como no caso de U_S, êste facto é uma conseqüência da ortogonalidade das funções $\Psi\,(x_t \mid n_u)$ que entram nos A_0. Esta ortogonalidade desempenha ainda um papel preponderante na dedução das fórmulas seguintes [1]:

1) Caso $A_{0i} = A_{0j}$, ou seja $i = j$:

$$H'\,(Q)_{ii} = \sum_{\sigma_1, \ldots, \sigma_N} \int A_{0i}^{*}\,(Q\,A_{0i})\,d\,\tau = \sum_{\substack{k',k''=1 \\ k' \neq k''}}^{N} \left\{ (n_{ik'}\, n_{ik''} \mid q \mid n_{ik'}\, n_{ik''}) - (n_{ik'}\, n_{ik''} \mid q \mid n_{ik''}\, n_{ik'}) \right\};$$

2) Caso em que as duas funções A_{0i} e A_{0j} apresentam iguais dois a dois todos os seus conjuntos de números quânticos, com excepção de um, n_{ik}, l_{ik}, m_{lik}, m_{sik}, $\neq n_{jk'}$, $l_{jk'}$, $m_{ljk'}$, $m_{jsk'}$. Temos:

$$H''\,(Q)_{ij} = \pm \sum_{k''} \left\{ n_{ik'}\, n_{ik''} \mid q \mid n_{jk'}\, n_{ik''}) - (n_{ik'}\, n_{ik''} \mid q \mid n_{jk''}\, n_{jk'}) \right\};$$

---

[1] A demonstração pode ver-se em Condon e Shortley, op. cit., págs. 172 e 173.

em que $\begin{cases} n_{ik'} \\ n_{jk'} \end{cases}$ representa o conjunto de números quânticos de $\begin{cases} A_{0i} \\ A_{0j} \end{cases}$ que não é igual a nenhum dos conjuntos de $\begin{cases} A_{0j} \\ A_{0i} \end{cases}$.

3) Caso em que há em $\begin{cases} A_{0i} \\ A_{0j} \end{cases}$ dois conjuntos de números quânticos, $\begin{cases} n_{ik'} \text{ e } n_{ik''} \\ n_{jk'} \text{ e } n_{jk''} \end{cases}$ que não são iguais a nenhum dos conjuntos de $\begin{cases} A_{0j} \\ A_{0i} \end{cases}$.

Então é

$$H''(Q)_{ij} = \pm \{ (n_{ik'}\, n_{ik''} \mid q \mid n_{jk'}\, n_{jk''}) - (n_{ik'}\, n_{ik''} \mid q \mid n_{jk''}\, n_{jk'}) \}.$$

Em todos os outros casos o elemento de matriz é nulo.

Nestas fórmulas o símbolo $(n_{ik'}\, n_{ik''} \mid q \mid n_{jk'}\, n_{jk''})$ representa

$$(n_{ik'}\, n_{ik''} \mid q \mid n_{jk'}\, n_{jk''}] = \sum_{\sigma_t,\, \sigma_v} \int \Psi(x_t \mid n_{ik'})^* \Psi(x_v \mid n_{ik''})^* q(x_t, x_v) \Psi(x_t \mid n_{jk'}) \Psi x_v \mid n_{jk''}) \, d\tau_t \, d\tau ,$$

com

$$q(x_t, x_v) = e^2/r_{tv}.$$

Os elementos de matriz $H''(Q)$ são, pois, funções lineares das grandezas $(n_{ik'}\, n_{ik''} \mid q \mid n_{jk'}\, n_{jk''})$ e estas já não dependem de 4 N variáveis, mas só de x_t, y_t, z_t, σ_t, x_v, y_v, z_v, σ_v (oito variáveis).

As grandezas $(n_{ik'}\, n_{ik''} \mid q \mid n_{jk'}\, n_{jk''})$ ainda podem, por seu turno, simplificar-se; para isso basta substituir as funções $\Psi(x \mid n)$ pelos seus valores em função de $R(r)$, $\Theta(\vartheta)$, $\Phi(\phi)$ e $\delta(\sigma, m_s)$, e $q(t, v) = e^2/r_{tv}$ pelo desenvolvimento em série $q = e^2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{r_>^k}{r_>^{k+1}} (\cos \omega)$ em que $r_<$ é o menor e $r_>$ o maior dos dois valores r_t e r_v, ω é o ângulo entre os dois raios vectores r_t e r_v, e $P_k(x)$ o símbolo representativo dos polinómios de Legendre de grau k. Nestas condições obtém-se:

$$(n_{ik'}\, n_{ik''} \mid q \mid n_{jk'}\, n_{jk''}) = \delta(m_{sik'}, m_{sjk'})\, \delta(m_{sik''}, m_{sjk''})\, \delta(m_{lik'} + m_{lik''}, m_{ljk'} + m_{ljk''}).$$

$$. \sum_{k=0}^{\infty} c_k(l_{ik'}\, m_{lik'}, l_{jk'}\, m_{ljk'})\, c_k(l_{jk''}\, m_{ljk''}, l_{ik''}\, m_{lik''}).$$

$$. R_k(n_{ik'}\, l_{ik'}\, n_{ik''}\, l_{ik''}, n_{jk'}\, l_{jk'}\, n_{jk''}\, l_{jk''}).$$

Nesta expressão os $\delta\delta$ representam símbolos de Kronecker; além disso é

$$\begin{cases} c_k(lm_l, l'm'_l) = \sqrt{\frac{2}{2k+1}} \cdot \int_0^{\pi} \Theta(k, m_l - m'_l)\, \Theta(l, m_l)\, \Theta(l', m'_l) \operatorname{sen} \vartheta \, d\vartheta \\ R_k(n_{ik'}\, l_{ik'}\, n_{ik''}\, l_{ik''}, n_{jk'}\, l_{jk'}\, n_{jk''}\, l_{jk''}) = \end{cases}$$

$$= e^2 \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{r_<^k}{r_<^{k+1}} R(r_1 \mid n_{ik'}\, l_{ik'})\, R(r_2 \mid n_{ik''}\, l_{ik''})\, R(r_1 \mid n_{jk'}\, l_{kj'})\, R(r_2 \mid n_{jk''}\, l_{jk''})\, dr_1\, dr_2$$

em que, tal como precedentemente, $r_<$ e $r_>$ são o menor e o maior dos dois valores r_1 e r_2.

Note-se que muitos dos elementos de matriz $H''(Q)$ são nulos, já pelo que diz respeito à não igualdade eventual de números quânticos atrás mencionada, já pela ocorrência de símbolos

de Kronecker na expressão de $(n_{ik'}\, n_{ik''} \mid q \mid n_{jk'}\, n_{jk''})$. Os que não são nulos, são funções lineares dos R_k, pois as funções Θ são *sempre* as funções de Legendre associadas (veja-se a pág. 54), e portanto os c_k são grandezas que só dependem de k, m_l e m'_l. Os valores de c_k encontram-se reünidos em tabelas (vejam-se as págs. 178 a 180 de Condon e Shortley, op. cit.) Como os elementos de matriz H (Q) ij em ordem às funções Ψ (S L J M) são funções lineares dos H'' (Q) e estes o são dos R_k, segue-se que os H $(Q)_{ij}$ são funções lineares dos R_k.

Estas funções lineares parecem à primeira vista, muito complicadas, pois os

$$(n_{ik'}\, n_{ik''} \mid q \mid n_{jk'}\, n_{jk''})$$

apresentam um $\sum\limits_{k=0}^{\infty}$. De facto não é assim, pois demonstra-se que a grandeza

$\int_0^{\pi} \Theta\,(k, m_l - m'_l)\, \Theta\,(l, m_l)\, \Theta\,(l', m'_l)\, \operatorname{sen}\theta\, d\theta$ só é diferente de zero se fôr $|l - l'| \leqslant k \leqslant l + l'$; portanto c_k é nulo para $k \geqslant l + l'$; êste facto vem limitar extraordinàriamente o número de parcelas não nulas de $(n_{ik'}\, n_{ik''} \mid q \mid n_{jk'}\, n_{jk''})$.

Os detalhes dêstes cálculos podem ver-se em Condon e Shortley, op. cit., capit. 6 e seguintes.

21) *Os elementos de matriz do hamiltoniano H. A equação secular*

No número precedente apresentámos alguns detalhes do cálculo dos elementos de matriz H_{ij} do hamiltoniano H.

Notemos agora que é (veja-se a pág. 50)

$$H = H_0 + H_1 + U_S = H_0 - \sum_{k=1}^{N} \left(Z\, e^2/r_k + V\,(r_k)\right) + Q + U_S\,,$$

em que Q representa a energia de interacção electrostática; portanto é

$$H_{ij} = H_{0ij} - \left\{ \sum_{k=1}^{N} \left(Z\, e^2/r_k + V\,(r_k)\right) \right\}_{ij} + Q_{ij} + U_{S\,ij}$$

em que os elementos de matriz são referidos às funções Ψ (S, L, J, M).

Ora H_0 satisfaz à equação $H_0\, A_0 = E_0\, A_0$ em que E_0 só depende da configuração electrónica. As funções Ψ (S, L, J, M) são funções lineares de funções A_0 tôdas pertencentes à mesma configuração electrónica. Logo é $H_0\, \Psi\,(S, L, J, M) = E_0\, \Psi\,(S, L, J, M)$, e o parâmetro E_0 é o mesmo da configuração. Portanto temos, designando por Ψ_i e Ψ_j duas funções Ψ (S, L, J, M):

$$H_{0ij} = \sum_{\sigma} \int \Psi_j^* \,(H_0\, \Psi_i)\, d\,z = \sum_{\sigma} \int \Psi_j^* \,(E_0\, \Psi_i)\, d\,z = E_0 \sum_{\sigma} \int \Psi_j^* \,\Psi_i\, d\,z = \begin{cases} E_0 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}.$$

Quere dizer, os elementos H_{0ij} são diagonais.

Consideremos agora a segunda parcela de H_{ij}, $-\left\{ \sum\limits_{k=1}^{N} \left(Z\, e^2/r_k + V\,(r_k)\right) \right\}_{ij}$.

A grandeza $\sum_{k=1}^{N} \left(Z e^2/r_k + V(r_k) \right)$ é do tipo $\sum_{k=1}^{N} f_k$. Neste caso f_k só depende das coordenadas r_k. O elemento de matriz de $\sum_{k=1}^{N} f_k$ em relação a duas funções de ordem zero, A_{0i} e A_{0j}, só não é nulo se houver em $\left\{ \begin{matrix} A_{0i} \\ A_{0j} \end{matrix} \right.$ um único conjunto de números quânticos, $\left\{ \begin{matrix} n_{ik'}, l_{ik'}, m_{lik'}, m_{sik'} \\ n_{jk''}, l_{jk''}, m_{ljk''}, m_{sjk''} \end{matrix} \right.$ que não seja igual a nenhum dos conjuntos de $\left\{ \begin{matrix} A_{0j} \\ A_{0i} \end{matrix} \right.$; ou então se fôr $i = j$. O valor dêste elemento é o seguinte para $i \neq j$:

$$\sum_{\text{spins}} \int A^*_{0j} \left(\sum_k f_k A_{0i} \right) d\tau = \pm \sum_{\sigma} \int \Psi(r \mid n_{ik'})^* f(r) \Psi(r \mid n_{jk''}) d\tau ;$$

ou seja, substituindo os $\Psi\Psi$ pelos seus valores:

$$= \pm \int R(r \mid n_{ik'} l_{ik'}) R(r \mid n_{jk''}) f(r) d r . \partial (l_{ik'} m_{lik'} m_{sik'}, l_{jk''} m_{k''} m_{sjk''}) .$$

Para que êste elemento não diagonal seja diferente de zero é preciso que seja $l_{ik'} = l_{jk''}$, $m_{lik'} = m_{ljk''}$, $m_{sik'} = m_{sjk''}$; só $n_{ik'}$ é que é diferente de $n_{jk''}$. Isto significa que os dois estados A_{0i} e A_{0j} pertencem a configurações electrónicas diferentes; é natural, à semelhança do que se passa com o operador U_S, que estes elementos sejam nulos ou negligíveis. Tomá-los-emos daqui em diante como nulos.

Os elementos diagonais valem

$$\sum_{\text{spins}} \int A^*_{0j} \left(\sum_k f_k A_{0i} \right) d\tau = \sum_{k=1}^{N} \int R(r \mid n_k l_k)^2 f(r) d r .$$

Note-se que estes elementos são os mesmos para todos os A_0 duma dada configuração electrónica, pois só dependem dos n_k e dos l_k; são, também os mesmos para tôdas as combinações lineares dêstes A_0, e portanto para as funções $\Psi(SLJM)$; em relação a estas temos, pois,

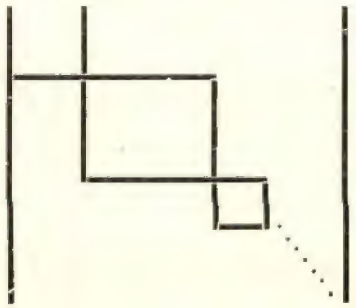
$$\left\{ \sum_{k=1}^{N} (Z e^2/r_k + V(r_k)) \right\}_{ij} = \begin{cases} \sum_{k=1}^{N} \int R(r/n_k l_k)^2 (Z e^2/r + V(r_k)) d r & i = j \\ 0 & i \neq j . \end{cases}$$

Das duas últimas parcelas de H_{ij} já dissémos o que há de fundamental.

Voltemos agora à equação secular.

Apresentámos esta equação como se ela fôsse constituida por um número finito de linhas e de colunas. Ora na realidade não é assim.

Note-se, porém, que os elementos de matriz correspondentes a estados pertencentes a configurações electrónicas diferentes, ou são nulos, ou são muito pequenos, o que os torna negligíveis na maior parte dos casos. Admitindo que são nulos (o que se faz muitas vezes), a equação secular toma a forma



$= 0$

na qual figuram fora dos quadrados todos os elementos (necessàriamente nulos) derivados de estados pertencentes a configurações diversas. Uma tal equação fracciona-se numa série de equações

$$\begin{vmatrix} & \\ & \end{vmatrix} = 0; \quad \begin{vmatrix} & \\ & \end{vmatrix} = 0; \quad \begin{vmatrix} & \\ & \end{vmatrix} = 0; \ldots\ldots$$

cada uma delas correspondente a uma configuração determinada.

Estas equações fraccionam-se por seu turno noutras de grau mais baixo por derivarem de estados Ψ (S L J M) e serem nulos para estes os elementos de matriz correspondentes a valores de J diversos.

Como se vê, segundo êste esquema, os valores possíveis da energia do átomo agrupam-se em conjuntos atribuíveis cada um dêles a uma configuração electrónica determinada. Vem daí a referência, que vulgarmente se faz, às energias que ocorrem na configuração tal ou qual.

22) *Determinação das grandezas* ζ_{nl} *e* R_k.

Para terminar esta exposição falta-nos dizer como se calculam as grandezas ζ_{nl} e R_k que figuram nas expressões de H $(U_S)''_{ij}$ e H $(Q)''_{ij}$.

Estas grandezas são funções de R (r | n, l) e para as conhecer é necessário começar por calcular R (r | n, l).

A separação de variáveis na equação

$$\Delta_k^2 \Psi (x_k, y_k, z_k) + \frac{h^2}{8 \pi^2 m} \Big(E_k - V (r_k) \Big) \Psi (x_k, y_k, z_k) = 0$$

(veja-se a pág. 53) conduz à equação

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R (r \mid n, l) \right) + \left[\frac{h^2}{8 \pi^2 m} \Big(E (n, l) - V (r) \Big) - \frac{l (l + 1)}{r^2} \right] R (r \mid n, l) = 0$$

Esta nova equação depende, porém, do potencial V (r), e àcerca dêste sòmente dissemos que devia ser escolhido de modo que os elementos de matriz do operador H_1 (veja-se a pág. 50) fôssem o mais pequenos possível.

O método que utiliza esta condição é devido a Fock. Parece que nunca foi utilizado devido a ser extremamente trabalhoso.

Em seu lugar aparecem-nos os métodos estatístico de Thomas-Fermi e o dos campos self-consistentes, de Hartree (compatíveis consigo próprios). Êste último conduz a resultados muito bons e, embora trabalhoso, tem sido aplicado muitas vezes. O método de Hartree vem muito bem exposto na memória original do autor [1].

Muitas vezes, porém, não se calculam as grandezas ζ_{nl} e R_k. Êste facto dá-se no caso de átomos cujos níveis energéticos foram em parte determinados empìricamente pela análise dos

---

[1] D. R. Hartree, Proc. Cambrigde Phil. Soc., vol. 24, págs. 89 a 111, 1928.

respectivos espectros ópticos. Isso significa que na equação secular se conhecem *alguns* dos valores do parâmetro E. Se estes valores forem em número superior ao dos parâmetros ζ_{nl} e R_k, a substituïção de E por tais valores fornece um sistema de equações em que os parâmetros ζ_{nl} e R_k são as incógnitas e em que o número de equações é superior ao das incógnitas. A estas equações pode-se aplicar o método dos mínimos quadrados, determinando-se assim os valores dos ζ_{nl} e dos R_k. A substituïção dêstes valores na equação secular fornece, por seu turno, os valores calculados do parâmetro E. Estes valores calculados da energia nunca coincidem rigorosamente com os valores empíricos, pois o nosso cálculo, embora complicado, não passa duma aproximação. Parecem ser, porém, suficientemente próximos para confirmarem os resultados da análise empírica dos espectros e bem assim para assinalarem a *região* onde possam estar os níveis ainda não revelados pela análise empírica.

Agradecemos ao Instituto para a Alta Cultura os auxílios que permitiram a realização dêste trabalho e facilitaram a sua publicação.

OBRAS DO PÔRTO DE LUANDA

Prosseguem com grande actividade os trabalhos de construção do pôrto de Luanda, iniciados há cêrca de um ano e a que a «Técnica» já se referiu, no seu número de Julho de 1941, num interessante artigo do Professor Cid Perestrelo, autor do projecto das obras em execução no referido pôrto.

Aspecto geral dos estaleiros de construção

As obras, adjudicadas em Março de 1940 à firma construtora «Anglo Dutch Engineering and Harbour Works C° Ltd.» e que devem estar concluídas em Agôsto de 1945, compreendem, numa primeira fase, a construção dum travessão acostável, com 300 metros de comprimento e 160 metros de largura, destinado à atracação simultânea de cinco grandes navios, com 600 metros lineares de muros-cais fundados à cota de (— 10^{m},50), e 160 metros lineares de muros-cais, fundados à cota de (— 11^{m},50); a construção de um trôço de muro-cais de concordância, com 100 metros de comprimento, fundado à cota (— 5^{m},50) destinado à atracação de dois navios de cabotagem; a regularização da margem, numa extensão de 1.715 metros lineares, desde o cais de cabotagem até ao actual cais da Alfândega; e o atêrro dos terraplenos a construir entre a margem existente

Instalação de lavagem de burgao

Instalação de betonagem e depósitos de blocos de betão

Guindaste-pórtico transportador para blocos de 90 ton.

Fabrico de blocos de betão de 90 ton.

Fabrico de placas de revestimento em betão para os taludes de protecção

e a linha de regularização, constituída pelos muros-cais e taludes de revestimento.

Para a execução destas obras serão necessários cêrca de 1.500.000 metros cúbicos de

Fabrico e depósito de tubos de betão para as canalizações de esgôto a construir nos terraplenos do pôrto

aterros, obtidos parte por dragagens e parte pelo desmonte dos morros existentes junto à margem; cêrca de 150.000 metros cúbicos de pedra de enrocamentos; cêrca de 60.000 metros cúbicos de betão em blocos de fundação e superstruturas; cêrca de 40.000 placas de betão destinadas a constituir o revestimento dos taludes; cêrca de 2.500 metros lineares de capeamentos para os muros-cais e taludes de revestimento; e cêrca de 6.000 metros lineares de tubos para canalizações de esgôto, destinados às áreas a aterrar.

O volume total de pedra a empregar nas obras é de cêrca de 220.000 metros cúbicos; o de cimento de cêrca de 20.000 toneladas; e o de madeira de cêrca de 1.500 metros cúbicos.

A área a conquistar ao mar é de aproximadamente 300.000 metros quadrados, sendo a superfície da área dragada, para a obtenção de profundidades destinadas ao acesso e estacionamento dos grandes e pequenos navios, de aproximadamente 100.000 metros quadrados.

Draga «Luanda» em trabalho

A parte destinada às instalações comerciais do pôrto será provido de armazéns, silos, vias férreas, guindastes, cabeços de amarração, canalizações de água, electricidade, telefones, etc.

O custo previsto para as obras, não compreendendo o equipamento e apetrechamento do pôrto, é de cêrca de 50.000 contos.

Batelão-grua para transporte de blocos de 90 ton.

As fotografias que acompanham esta notícia, e que devemos, como as notas juntas, à obsequiosa cedência do Professor Cid Perestrelo, dão idéia do adiantamento dos trabalhos, cujos progressos a «Técnica» regista com aprazimento nas suas páginas.

Pedreira em exploração para as obras do pôrto

VIDA ESCOLAR E ASSOCIATIVA

Relatório da Direcção da A. E. I. S. T. no ano de 1941-1942

1 — Aspectos gerais

É nosso intento apresentar a todos os alunos do Instituto, sem excepção, qual a acção desenvolvida pela Direcção da A. E. I. S. T. durante o ano lectivo findo. E dizemos *a todos,* porque os interêsses em jôgo são de tal modo gerais, que não podemos distinguir entre os que auxiliam a Associação e aqueles que, por falta de meios ou por falta de espírito associativo, se encontram alheados dela.

A mais importante das questões que tivemos de tratar, e absorveu a maior parte da nossa actividade, foi a relacionada com o aumento do quantitativo das propinas. A Direcção, colaborando com as outras escolas superiores, envidou todos os seus esforços no sentido de serem melhoradas as condições em que ficaram colocados os estudantes universitários.

Pela sua importância destaca-se em seguida, o problema da *escolha da Direcção da Associação.*

Entendeu a Direcção da Associação que o processo pelo qual ela tinha sido escolhida não era racional. Adoptou, portanto, o qualificativo de «Provisória» e tratou de organizar uma Junta de Delegados de Curso com plenos poderes para aceitar ou regeitar a Direcção Provisória.

Procedeu-se imediatamente à eleição dos Delegados de Curso, num total de 24, um por ano e por especialidade.

Na primeira reünião que a seguir se realizou, a Direcção Provisória foi aceite e esta escolha foi sancionada pelo Director do Instituto.

A Junta de Delegados de Curso, uma vez cumprida a sua mais importante missão, viu-se a braços com um assunto importantíssimo — a elaboração dos Estatutos; aqueles que existiam tinham caducado havia já muitos anos.

Nomeou-se uma Comissão para êsse efeito e o seu esbôço foi levado perante a Junta que os aprovou depois de fazer algumas emendas respeitantes ao mecanismo da eleição das Direcções futuras. Neste particular foram aumentados os poderes do Presidente embora êste continuasse, no que dizia respeito à escolha da Direcção, submetido à autoridade da Junta de Delegados. Esta pode, em qualquer altura, demitir o Presidente, desde que êste abuse dos poderes que lhe foram conferidos.

O organismo assim criado mostrou-se duma grande utilidade, já elegendo a Direcção definitiva e o Conselho Fiscal, já estabelecendo a indispensável ligação com a massa associativa.

Esta ligação ficou bem patente na marcação dos exames de acôrdo com a Direcção do Instituto. Se nem sempre houve unanimidade nesta marcação, a razão está no pouco interêsse que muitos dos alunos manifestaram na eleição dos seus Delegados e no alheamento que alguns dos professores testemunharam a respeito daquela marcação.

Por iniciativa do Presidente da Junta foi ainda resolvido fazer um inquérito para saber quais as matérias actualmente professadas nas cadeiras do Instituto, de modo a permitir a eliminação dum certo número de deficiências, o que infelizmente não foi por diante.

2 — Actividade do Grupo Desportivo

O ano de 1941-42 não foi bom para o G. D., pois a actividade foi, logo de início, muito prejudicado pela sua questão das propinas, que tão profundamente agitou a massa escolar durante os primeiros meses do ano lectivo.

Apesar desta e outras dificuldades, sempre se conseguiu fazer alguma coisa.

Na secção de Gimnástica foi-nos grato verificar o aumento de freqüencia, o que foi devido, em grande parte, à competência do professor. Porém, continuou a lutar-se com o grande problema dos horários que obrigam a realizar as sessões de gimnástica depois das aulas; parece, no entanto, que o problema está em estudo e que vão prever-se, oficialmente, horas destinadas a êsse fim.

Em Volley-Ball, apesar da crise moral provocada pela saída do seu fundador e principal animador Eng. Augusto Cavaco, mantivemos a superioridade costumada, ganhando o título de Campião de Lisboa, nas categorias de Honra e 2.ª, e o Campionato Nacional Universitário. Conseguiu-se dêste modo, não quebrar a série ininterrupta de vitórias que a nossa equipa principal tem conquistado nos últimos seis anos.

Durante o ano lectivo passado a Secção de Xadrez teve pouca actividade interna; porém, a nossa actividade externa foi brilhante, visto termos ganho os Campionatos de Lisboa por equipes e individual.

A modalidade de Esgrima foi daquelas que mais progrediu durante o ano, porque, apesar de se terem enviado poucos atiradores a provas externas, conseguiu-se preparar um número razoável de sócios que poderão êste ano concorrer a essas provas.

Nas secções de Ténnis e Tiro as dificuldades presentes, que originam a falta de material no mercado, fizeram diminuir bastante a sua actividade.

Quanto às secções de Foot-Ball, Hand-Ball, Rugby e Hockey, elas pouco futuro poderão ter na nossa Associação por falta de instalações indispensáveis para a sua prática.

Na Natação e no Hockey em patins pouco se fêz. O desenvolvimento destas duas secções está dependente da resolução de duas obras indispensáveis; para a Natação, o aquecimento da Piscina, para o Hockey, a iluminação do rink de Patinagem. Infelizmente a primeira

está dependente do aquecimento geral do Instituto, e, portanto, a sua solução sujeita a grande demora, enquanto que a segunda não pode ser solucionada presentemente, visto a situação actual tornar proïbitiva a compra de material eléctrico.

Guardamos propositadamente para o fim o problema que é sem dúvida um dos mais importantes para o Grupo Desportivo: o do campo de jogos. Sem a sua resolução, a modalidade desportiva basilar, aquela que é o melhor índice do valor desportivo de uma Associação de Estudantes — o Atletismo — não poderá progredir. É necessário remodelar o nosso campo, tão agradável à vista como pouco próprio para a prática do atletismo. Uma obra destas não poderá ser empreendida só pela Associação, e, por isso, é que a Direcção do G. D. continuou a tratar do assunto com o Sr. Eng. Almeida e Brito, que tem já concluído o projecto para essa remodelação. Esperamos, portanto, que êste ano o problema ficará arrumado.

3 — Actividade da Caixa de Empréstimos de Honra e Auxílio a Estudantes Pobres.

Durante o ano passado a Caixa conseguiu, apesar dos seus fracos recursos, emprestar 11.731$00 a trinta e oito sócios e dar 2.093$00 para pagamento de propinas a três colegas que se encontravam em situação bastante difícil. A um dêsses colegas foram ainda dadas fôlhas por intermédio da Secção de Fôlhas.

Para realizar esta obra recebeu a Caixa 1.360$00 dos seus sócios subscritores, 1.280$00 dos sócios antigos alunos e 1.518$00 de dádivas. A verba recebida dos subscritores tem sido até ao princípio dêste ano quási a única fonte de receita da Caixa. São 20 dos nossos mestres que desde o início têm mantido esta magnífica obra de assistência com cotas mensais médias de 8$00. Aproveitamos esta oportunidade para lhes manifestar a nossa gratidão por êsse nobre gesto. Apesar disso, as dificuldades presentes que se fazem sentir bastante entre a nossa população escolar não podem ser remediadas dêste modo. É preciso que os nossos mestres subscritores contribuam de forma ainda mais generosa, que os restantes se decidam a apoiar uma obra que tem tido uma acção nobre e utilíssima, e que os nossos colegas de situação mais desafogada não se façam demorar nessa mesma resolução.

Alguns colegas teriam êste ano sido forçados a abandonar um curso já em meio por causa do aumento do custo das propinas, se a Caixa não lhes tivesse dado ou emprestado o dinheiro para êsse fim. A Associação compreendeu esta situação e entregou à Caixa a sua receita dos sócios antigos alunos, actualmente designados por extraordinários.

Se não se fizesse propaganda da existência da Caixa, como o entendemos necessário, precisaríamos no ano que começa de dar 4.000$00 em subsídios e de fazer empréstimos no valor ds 15.000$00. As receitas precisariam de subir para 6.000$00. Em face desta propaganda, porém, o movimento será muito maior e precisaremos de muitíssimo mais dinheiro. Ajudemo-nos uns aos outros.

Para terminar só mais uma referência ao movimento de empréstimos. Emprestaram-se 11.731$00 êste ano porque se receberam dêsses empréstimos e dos anteriores 8.384$00. Isto mostra que a orientação seguida e a seguir é a de fazer empréstimos a curto prazo, pois com os nossos recursos só dêste modo é possível fazer alguma coisa de interessante. Os empréstimos a longo prazo só em caso de absoluta necessidade podem ser feitos.

O montante das dívidas é elevado e lamentamos que para êle contribuam alguns engenheiros a quem esta Caixa valeu e que hoje leem as cartas que lhes mandamos com indiferença. Outros por desleixo têm vindo a demorar o pagamento das suas dívidas mas julgamos que, brevemente, ficará saldada uma grande parte dos empréstimos.

4 — Actividade da Secção de Fôlhas

Os principais objectivos da nossa actividade neste campo foram:

1.º — Dar aos estudantes do I. S. T. elementos de trabalho dignos de confiança, e

2.º — Fornecer-lhes a preços não comerciais.

Em resultado do nosso esfôrço conseguimos que, no fim dêste ano, a A. E. I. S. T. ficasse possuindo as seguintes edições:

Matemáticas Gerais; Exercícios de Matemática Gerais; Geometria Descritiva; Exercícios de Geometria Descritiva; Cálculo Integral, Diferencial e das Variações; Física Geral e Experimental. 1.ª parte; *Cálculo das Probabilidades e Teoria de Erros; Química Inorgânica.* 1.ª parte (prática); *Mecânica Racional; Análise dos Catiões; Caminhos de Ferro; Prática de Caminhos de Ferro; Pontes; Teoria da Elasticidade e Complementos de Resistência de Materiais; Construções e Instalações Industriais; Electrotecnia Geral.*

A colaboração desinteressada de Professores e Assistentes (que de novo agradecemos) garante a consecução do 1.º dos nossos objectivos.

Pelo que respeita ao 2.º indicaremos que o custo de fôlhas de outras edições era de 110$00 em média para Matemáticas Gerais, Geometria Descritiva, Cálculo, Mecânica, etc. e que nós o reduzimos para 65$00 preço, apesar de tudo, exagerado devido aos nossos inevitáveis erros de previsão. Em fôlhas de menor preço, a redução não pôde ser tão grande. Julgamos que, mesmo nas desfavoráveis condições actuais, os preços poderão ser descidos ainda e melhor remuneradas as pessoas que trabalham nas nossas edições.

Afim de se poder ter uma idéia mais precisa do que foi o real esfôrço dispendido pela A. E. I. S. T. neste campo apresentaremos, a seguir, um resumo do movimento da conta de Caixa das Fôlhas que é, de per si, quási tão importante como o da Caixa da A. E. I. S. T.

DEVE	Caixa das Fôlhas	HAVER
Venda de Fôlhas	33.980$85	Papel (181.500 fôlhas) . . . . . 7.781$15
Caixa da A. E. I. S. T.	9.617$40	Stencil (1.800 fôlhas) . . . . . 3.455$00
		Tinta (33 kg) . . . . . 1.066$00
		Cópias (1.935 ozalid, etc.) . . . . . 2.908$25
		Dactilógrafos (2) . . . . . 5.116$50
		Impressores (1) . . . . . 2.188$80
		Revisores e Desenhadores (6) . . . . . 2.692$50
		Autores (9) . . . . . 11.738$00
		Diversos (corrector, fretes, etc.) . . . . . 483$80
		Caixa da A. E. I. S. T. . . . . 6.168$25
	43.598$25	43.598$25

Como é fácil de ver a Caixa da A. E. I. S. T. é crédora da importância de 3.449$15 que acrescentada ao saldo do ano anterior (4.789$20) coloca a Secção de Fôlhas na situação de devedora de 8.238$35. Por outro lado a máquina impressora foi-nos oportunamente cedida pelo Ex.mo Director do I. S. T. o que nos permitiu transformar o fundo de amortização noutro para aquisição de uma nova máquina o que põe entre as nossas obrigações a verba de 2.327$85 obtida pela mecânica de amortização anteriormente estabelecida. Como nos resta pagar 4.400$00 a autores e, além disso, o valor das edições em depósito pode, sem exagêro, ser computado em 30.000$00 a situação da Secção de Fôlhas pode resumir-se no seguinte:

ACTIVO	Inventário da secção de Fôlhas	PASSIVO
Edições	30.000$00	Caixa da A. E. I. S. T. . . . . 8.238$35
		Fundo de aquisição de máquinas . . . . . 2.327$85
		Autores . . . . . 4.400$00
		Lucros . . . . . 15.033$80
	30.000$00	30.000$00

Os lucros que êste inventário mostra podem parecer exagerados mas, se atendermos a que não é possível transformá-los totalmente em dinheiro no próximo ano lectivo e que a tarefa a realizar dentro dêste campo exige ainda um grande esfôrço financeiro à A. E. I. S. T., ver-se-á que o não são.

5 — Actividade do Departamento Cultural

Competindo a êste Departamento da A. E. I. S. T. desenvolver a cultura geral dos sócios, organizou o ano passado:

a) Três cursos: «Aplicações da teoria dos circuitos oscilantes aos esquemas modermos», pelo Eng.º Paulo de Brito Aranha; «Língua alemã», pelo professor Dielh; «Língua italiana», pelo professor Rossi.

Procurou-se fazer um curso de língua inglêsa, mas não foi possível vencer as dificuldades que se apresentaram, devido à falta de professores que o grande número de alunos matriculados no Instituto Britânico provocou.

b) Seis sessões de cinema: duas com filmes cedidos pelo Iustituto de Cultura Italiana; duas com filmes cedidos pelo Centro Luso-Alemão de Intercâmbio Cultural; uma com filmes cedidos pela Philips Portuguesa; uma com filmes cedidos pela Société des Gazogènes Imbert.

Foi-nos impossível ir mais longe neste campo pela escassez actual de filmes técnicos no nosso país.

c) Seis conferências: «Novas matérias industriais», pelo Dr. Richard Lepsius (Centro Luso-Alemão); «O Betão prè-esforçado de Freyssinet», pelo Eng.º Vieira Barbosa; «Técnica dos carburantes de substituïção», pelo Prof. Edmond Zedet (Instituto Francês em Portugal); «Acção do desejo e da aversão sôbre a crença», pelo Eng.º Marius Latour; «Idéias novas sôbre a Elasticidade e a Plasticidade» e «Novas instalações portuárias», ambas pelo Eng.º Albert Cacquot.

Mais algumas tinhamos prometidas, mas circunstâncias especiais levaram ao seu adiamento para o próximo ano.

d) Três concertos: Um de música ligeira e variedades (E. N. e F. N. A. T.); um de música sinfónica (E. N.); um de música de câmara (S. P. N.).

Nêste campo obtivemos ainda a entrada dos sócios noutros concertos.

6 — Actividade do Departamento Aeronáutico

A actividade dêste Departamento foi pràticamente nula. No entanto, ficaram estabelecidas as bases para o

ressurgimento desta importante Secção, de carácter simultâneamente desportivo e científico, não só com a aquisição de instalações próprias como também com a nomeação do Dr. Eng.º Varela Cid para a sua direcção.

A Associação acedeu em dar ao Departamento Aeronáutico uma verba de 1.500$00, necessária para completar o planador em construção nas Oficinas do Instituto.

7 — Actividade da Secção Fotográfica

Esta secção conta desde êste ano com instalações próprias e modificadas expressamente para o fim em vista. Procedeu-se ao trabalho prévio de reünir todos os elementos que têm interêsse por assuntos de fotografia e isso permitirá que a Secção entre agora em plena actividade.

No entanto, ela já começou a dar as suas provas fotografando, com todos os pormenores necessários para fazer uma reconstituïção, os quadros da Exposição Técnica Alemã que indicavam esquemàticamente as diferentes fases do fabrico de produtos sintéticos, o que será de grande utilidade para o Curso de Química.

8 — Actividade da Secção de Artigos de Papelaria

A actividade desta secção foi muito importante, devido ao seu movimento interno.

Com efeito, ela foi orientada no sentido de não permitir dentro da nossa Associação uma secção destinada a dar lucros, pois, como se verificou, os artigos estavam a ser vendidos com um ganho em cada caderno à volta dos 20 a 25 %. Esta margem foi imediatamente reduzida para 10 %, o que se justifica pela possível deterioração dos artigos e para compensar o empate de capital.

O movimento interno foi grande, tendo-se pela primeira vez posto à venda lápis, borrachas e dois tipos de papel liso. Não foi possível passar a vender também papel Wathmann, contínuo e vegetal, porque mais uma vez se verificou que um só empregado não pode desempenhar simultâneamente as funções próprias da actividade desportiva da Associação e as de vendedor de material escolar. Tornava-se para isso indispensável novo empregado e as disponibilidades da Associação não o permitem.

Procurou-se obter da parte da casa Pimentel e Casquilho reduções apreciáveis na compra de material de desenho, mas as condições por elas apresentadas não foram de molde a tomar mais êsse empreendimento.

9 — Conta de Caixa

RECEITA			DESPESA		
Saldo do ano anterior			*Pessoal*		
Valor de 5 acções da C. A. M. P.	500$00		Vencimentos e gratificações . .		9.351$00
Dinheiro em caixa do ano anterior	3.574$20	4.074$20	Grupo Desportivo		11.112$15
Cotas e Jóias		31.783$50	Gastos gerais		2.757$95
Grupo Desportivo		8.225$90	Departamento cultural		2.462$10
Receitas Gerais			Papelaria		8.827$10
Fôlhas		4.424$50	Fôlhas		9.617$40
Papelaria		7.999$20	«Técnica»		9.996$00
Cantina.		646$05	Secção fotográfica		355$00
Mocidade Portuguesa		2.000$00	Renovação de material		688$10
Subsídio do Ministério da E. N. .		675$00	Material de escritório		707$05
Subsídio do I. S. T.		350$00	Caixa de empréstimos de honra . .		405$00
Subsídio da Comissão do Baile . .		400$00	*Saldo para o ano seguinte*		
Cartões e emblemas		434$00	Valor de 5 acções da C. A. M. P.	500$00	
Indemnizações para conservação de material		211$00	Dinheiro em caixa para 1942-43	4.509$30	5.009$30
Diversos		64$80			
		61.288$15			61.288$15

José Henrique Arandes
António Augusto Pessoa Monteiro
Nuno Maria Godinho Mourão
Emílio César Monteiro de Almeida
João Avelino da Rocha Cunha Serra

DO MUNDO TÉCNICO

A sobrealimentação do motor Diesel de dois tempos (1)

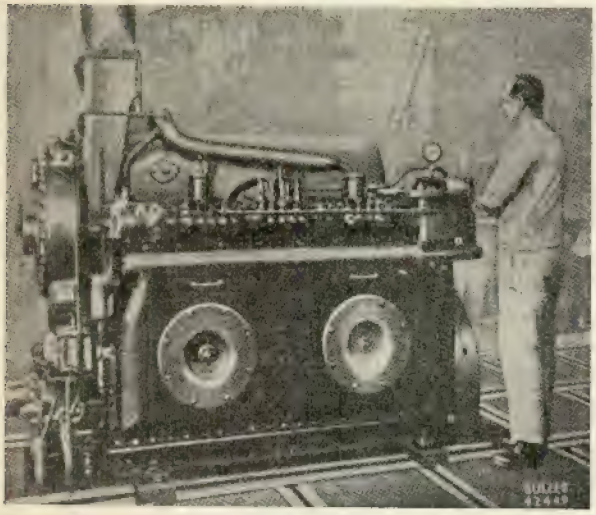


Fig. 1. Vista do primeiro motor de dois tempos sobrealimentado combinado com uma turbina de gás de escape, que atingiu uma pressão efectiva média de 12 kg/cm2

A sobrealimentação do motor Diesel de dois tempos, tendo sido sempre um dos principais objectivos dos construtores de motores, foi alvo de particular atenção depois de ter sido possível sobrealimentar o motor de quatro tempos e, por isso, de alargar consideràvelmente as suas aplicações. É verdade que, já depois de 1912, o motor de dois tempos Sulzer é provido dum dispositivo de alimentação adicional, cujo princípio comporta uma certa sobrealimentação. Por êste processo o cilindro ficava, no início do passeio de compressão cheio de ar a uma pressão superior à usual limitando-se porém esta pressão de alimentação adicional a cêrca de 1,2-1, 4 atm. abs., consoante a pressão de lavagem. O aumento de potência que assim se obtinha era, em relação aos motores desprovidos dêste dispositivo, de 10 a 30 %. Esta pressão de sobrealimentação manteve-se até quási ao presente, nos motores de dois tempos, pràticamente sem alteração. A causa está, sobretudo, em que o acréscimo da pressão de sobrealimentação conduz a um aumento da potência absorvida pela bomba de lavagem e por conseqüência de consumo de combustível, pelo menos, sempre que a energia contida nos gases de escape, não seja utilizada.

A aplicação de pressões de sobrealimentação mais elevadas exige, portanto, que a energia dos gases de escape seja recuperada pela sua transformação em energia mecânica útil; a turbina de gás de escape é hoje o meio indicado para realizar esta transformação.

A solução mais simples consistiria em fazer com que esta turbina accionasse um ventilador, que fornecesse todo o ar necessário à lavagem e à sobrealimentação. Êste processo de sobrealimentação é porém inaplicável ao motor de dois tempos, pois sòmente para as grandes cargas a potência da turbina chega para fornecer o ar necessário. Além disso o motor de dois tempos assim sobrealimentado não poderia arrancar por a velocidade da turbina de escape aumentar muito lentamente. É pois indispensável na sobrealimentação do motor de dois tempos fornecer ao grupo de sobrealimentanção a energia que lhe falta durante o arranque e nas cargas reduzidas.

No precesso Sulzer designado pelo uso por «sobrealimentação sob alta pressão» emprega-se uma bomba de lavagem de dimensões suficientes para fornecer todo o ar necessário, accionada pela cambota; o

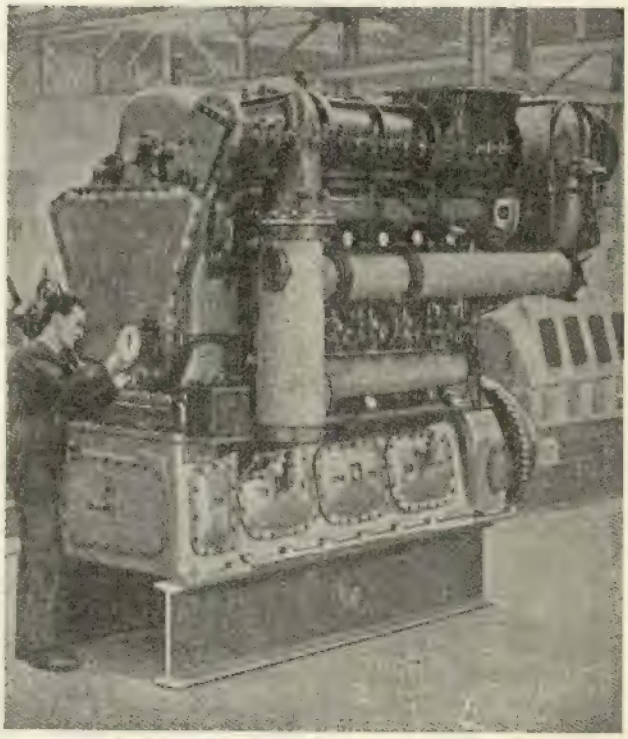


Fig. 2. Primeiro motor de dois tempos, de duas cambotas e de êmbolos opostos, com a potência de 1560 HP à velocidade de 850 rot/min, sobrealimentado à pressão de 2 atm. abs.

(1) Resumo duma memória apresentada por M. F. Oederlin, administrador-delegado da Casa Sulzer Frères, sôbre os últimos resultados adquiridos no domínio da sobrealimentação do motor Diesel de dois tempos.

aproveitamento da energia mecânica produzida pela turbina obtém-se ligando-a também à cambota por meio dum trem de engrenagens. A bomba de lavagem pode ainda ser substituída por um ventilador montado no veio da turbina que engrena na cambota, também por meio dum trem de engrenagens. Nestes dois casos o compressor põe-se em marcha desde o arranque e pode por conseqüência fornecer imediatamente todo o volume de ar necessário à lavagem. Em princípio, podia-se escolher a pressão de sobrealimentação mas existe um valor mais económico, que varia de caso para caso.

Verificou-se que para as grandes cargas e em unidades importantes a potência da turbina chega para o compressor transmitindo-se o excedente da potência à cambota pelas engrenagens mencionadas. Nos grupos de potência menor a turbina de escape fornece, pelo

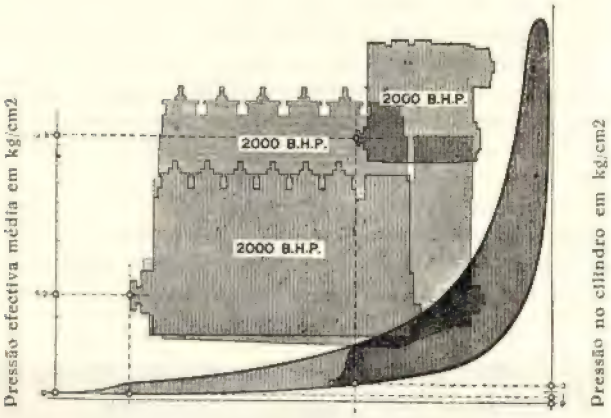


Fig. 3. Tamanhos comparados dum motor de dois tempos, não sobrealimentado de culatra e com a potência de 2000 HP, dum motor de dois tempos não sobrealimentado de êmbolos mergulhadores e de 2000 HP, e dum motor de dois tempos de êmbolos opostos, de 2000 HP. sobrealimentado, segundo o processo Sulzer. A superfície do diagrama a tracejado escuro representa o trabalho desenvolvido nos cilindros do motor sobrealimentado. A superfície do diagrama representando o trabalho da turbina de escape e do compressor de sobrealimentação é aproximadamente equivalente à parte do diagrama do tracejado mais claro, correspondente ao motor não sobrealimentado.

menos, uma grande parte da potência necessária ao compressor. Duma maneira geral pode admitir-se que a potência da turbina e a do compressor são aproximadamente equivalentes.

Estas considerações incitaram a casa Sulzer Frères, há alguns anos, a procurar a realização prática da sobrealimentação do ciclo de dois tempos. Construiu-se primeiramente um motor especial que foi submetido a uma série de ensaios. Sobrealimentado a 2 atm. abs., êste motor atingiu, com um escape perfeitamente claro, uma pressão efectiva de 12 kg/cm², que se poude fàcilmente manter indefinidamente. Sobrealimentado a 3 atm. abs. obteve-se uma pressão efectiva média de 1 kg/cm² mantida igualmente durante uma duração indefinida com um escape perfeitamente claro. Aumentando convenientemente o volume de compressão a sobrealimentação dêste motor foi progressivamente levada até 6 atm. abs., o que elevou a pressão média a 18 kg/cm². Os gases de escape sendo ainda bastante puros devido ao grande excesso de ar empregado constituem um fluido ideal para uma turbina de escape.

Estes resultados conduziram à construção dum motor sobrealimentado a 2 atm. abs. (fig. 1) em que se aplicou, para obter uma pressão específica tão grande quanto possível, o princípio dos êmbolos opostos.

A turbina de escape montada na extremidade do colector de escape transmite a sua potência à cambota por meio dum trem de engrenagens. O ar de lavagem e de sobrealimentação é fornecido por compressores de êmbolo accionados pela cambota. Todos os elementos de construção especialmente estudados comportaram-se perfeitamente. Em particular, a união mecânica da turbina à cambota não originou as menores dificuldades. Mesmo com os maiores frios o motor arrancou sempre com tôda a segurança.

Em unidades importantes a transmissão mecânica entre a turbina e a cambota pode ser substituída por uma união hidráulica ou electromagnética. A transmissão de energia pode também efectuar-se por um dispositivo eléctrico: o grupo de sobrealimentação é então accionado por um motor eléctrico.

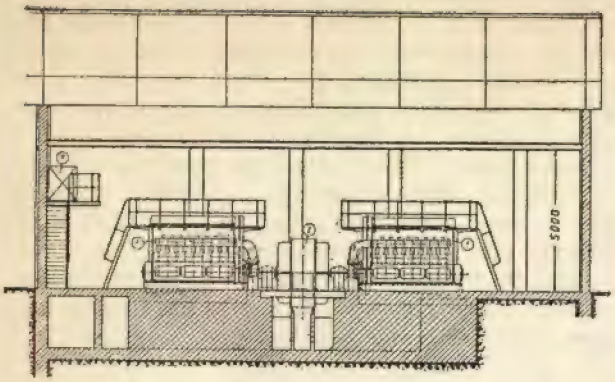
Outros ensaios se seguiram em diversos motores a fim de estudar a sobrealimentação em altas velocidades atingindo a pressão efectiva média valores de 12, 15 e 18 kg/cm² para pressões de sobrealimentação de 2, 3 e 6 kg/cm². Verificou-se também que o aumento de potência é pràticamente proporcional ao grau de sobrealimentação tanto nas pequenas como nas grandes máquinas.

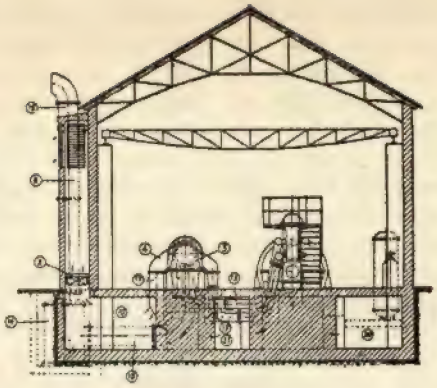
A fig. 2 representa um novo tipo de motor, que permite obter duma maneira bastante eficaz as vantagens da sobrealimentação a alta pressão. É um motor com seis cilindros, 2 cambotas e de êmbolos opostos.

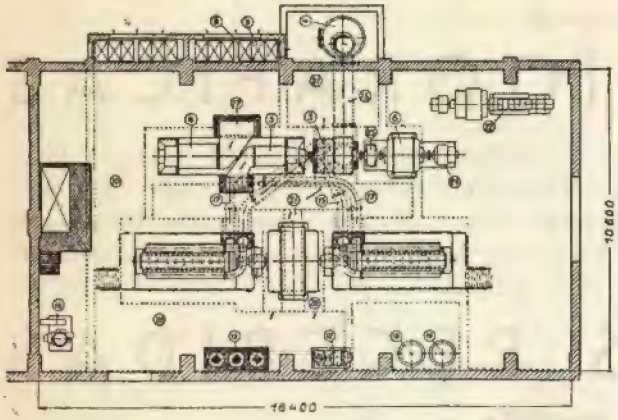
Todos os elementos foram estudados para permitirem a pressão de sobrealimentação a 6 atm. abs., o que aumentou a potência de 1560 HP a 2340 HP reduzindo-se o pêso unitário da máquina.

A sobrealimentação sob a pressão de 6 atm. abs. constitue o caso particular em que a potência desenvolvida pelo motor Diesel é sensìvelmente igual à que é absorvida pelo compressor de sobrealimentação. Neste caso desligando a turbina de gás de escape do motor Diesel e do compressor não se altera em coisa alguma o balanço da energia de todo o conjunto. O grupo constituído pelo motor Diesel e pelo compressor é então designado por «gerador de gás potencial» e tem um papel análogo ao de uma caldeira numa central de fôrça motriz a vapor. A turbina de vapor desta central corresponde a turbina de gás. Uma mesma turbina de gás potencial pode ser alimentada por diversos geradores.

Êste sistema, constituindo uma das realizações possíveis da turbina de gás, tem um rendimento térmico notável, atingindo 35 a 40 % sem o emprêgo de nenhum dispositivo de recuperação e sem que as temperaturas de regime permanente ultrapassem 450° a 500° C. As







1 — Motores Diesel-Zulzer
2 — Alternador
3 — Turbina de gás
4 — Compressor de ar, 1.º andar
5 — Compressor de ar, 2.º andar
6 — Motor eléctrico para o arranque
7 — Reservatório de combustivel
8 — Canal de ar
9 — Filtro de ar
10 — Câmara de ar
11 — Ponte rolante
12 — Compressor para o ar de arranque
13 — Garrafas de ar para o arranque
14 — Câmara de escape
15 — Condutor de escape
16 — Epurador para o óleo de lubrificação
17 — Condutor de ar
18 — Refrigeração de óleo
19 — Refrigeração de água
20 — Canal de ar fresco
21 — Canal de ar quente
22 — Grupo de socorro
23 — Trem de engrenagens
24 — Excitatriz

Fig. 4 — Disposição geral duma central de fôrça motriz de 7000 HP, equipada de dois motores de dois tempos sobrealimentados, cada um de duas cambotas e com êmbolos mergulhadores. O grupo de sobrealimentação é separado. A uma pressão de sobrealimentação de 3,5 atm. abs. a pressão efectiva média atingiu a plena carga a 15,3 kg/cm2

velocidades críticas não são de temer, pois os geradores de gás potencial apenas estão ligados por uma massa de gás perfeitamente elástica. Com êste sistema pode obter-se potências até agora inacessíveis ao motor Diesel sem que o pêso unitário destas instalações atinja o das instalações de vapor.

É possível aumentar a pressão de sobrealimentação acima de 6 atm. abs. Então a turbina de escape tem de participar no trabalho de compressão, pois a potência que o motor Diesel desenvolve não chega.

As figs. 3 e 4 dão uma ideia dos espaços necessários aos motores de dois tempos sobrealimentados sob alta pressão. Na fig 4 tem-se uma instalação fixa de fôrça motriz com dois motores de dois tempos sobrealimentados, que accionam um alternador. O ar da levagem e de sobrealimentação é fornecido por um compressor axial composto de dois andares, um de baixa e outro de alta pressão, com refrigeração intermediária, accionado pela turbina de escape. O déficit de potência da turbina no momento de arranque é iliminado por um motor eléctrico alimentado pela rêde da central e girando em vazio quando os motores Diesel atingem a sua carga normal.

O motor Diesel de dois tempos sobrealimentado sob alta pressão terá um interêsse especial nas aplicações em que se torna necessário reduzir o pêso da instalação motriz como sucede na tracção, em certas categorias de navios e em geral para os grupos de pontas, de reserva ou de socorro.

Pode assimilar-se o grupo de sobrealimentação a uma turbina de combustão uniforme em que a câmara de combustão foi substituída pelo motor Diesel. Mas, enquanto que no segundo caso a energia útil é representada pela diferença entre a energia da turbina e do compressor, no primeiro caso é esta diferença aumentada da potência produzida nos cilindros do motor Diesel.

O rendimento térmico atinge 40 % no caso da sobrealimentação em lugar de 18 % na turbina de gás simples.

A substituïção da câmara de combustão pelo motor Diesel justifica-se também pela necessidade que há de arrefecer os gases, cuja temperatura inicial é de cêrca de 1.500° a 2.000°, até 500 ou 600° antes de serem conduzidos à turbina. Em lugar de se efectuar êste arrefecimento por mistura de um excesso de ar como se faz no caso da turbina simples efectua-se pela expansão dos gases no cilindro no caso do motor sobrealimentado sob alta pressão, onde produzem ao mesmo tempo energia útil.

Se, no motor Diesel sobrealimentado sob esta pressão se eleva progressivamente a pressão de sobrealimentação a cilindrada, para um volume de compressão constante, diminue sucessivamente; no limite, esta ci-

lindrada será nula, e do motor Diesel só resta o volume de compressão, que não é outra coisa senão a câmara de combustão da turbina a gaz hipotética a alta pressão, de realização actualmente ainda impossível devido às altas temperaturas que põe em jôgo. Viu-se porém que êste ciclo funciona com bom rendimento no motor Diesel sobrealimentado sob alta pressão ou na instalação motriz de gás potencial.

Sob o ponto de vista dos princípios gerais de construção é também lógico, que a combustão e as altas pressões de compressão se dêem no cilindro do motor Diesel, que é o órgão mais apto a resistir à sua acção. E como a valiosa cilindrada do motor Diesel é na parte inferior do diagrama imperfeitamente utilizada é igualmente lógico de deixar esta parte do trabalho de expansão e compressão a compressores radiais ou axiais e a turbinas, máquinas que são notàvelmente mais baratas, mais leves e perfeitamente apropriadas aos grandes débitos sob pressões fracas ou médias.

Estas considerações juntas aos resultados obtidos mostram que razões importantes justificam a combinação do motor Diesel com a turbina a gás. Esta combinação traz sôbre a turbina de gás na sua forma actual uma melhoria no rendimento de 100 % e sôbre o motor Diesel não sobrealimentado um aumento de pressão efectiva média de 100 a 200 %.

Da «Technique Suisse»

NOTAS BIBLIOGRAFICAS

Acumuladores

Pelo Eng.º JULIÃO SENNA

157 pág. — Preço 10$00

Recebemos o livro «Acumuladores», do Eng.º Julião Senna.

O estudo que faz sôbre acumuladores de Pb e alcalinos bem como as noções que expõe sôbre montagens, carga e descarga e manutenção dos mesmos, parece-nos de algum interêsse para quem tenha de tratar estes assuntos.

PUBLICAÇÕES RECEBIDAS

Não periódicas

Disquisitiones mathematicae et physicae — Publicatiile Institutului Regal de Cercetari Stiintifice al Romaniei.

Instituto de Pesquizas Tecnológicas de São Paulo — Brasil. Boletim n.º 6.

Relatório da Administração Geral do Pôrto de Lisboa — Ministério das Obras Públicas e Comunicações.

Águas de Portugal em 1940 — Ministério da Economia, Eng.º Luiz Acciainoli.

Motores a gás horizontais — Socony-Vacum Oil Company.

Conferências da Liga Portuguesa de Profilaxia Social — 5.ª Série.

Manual de Jogos da M. P. — Direcção dos Serviços de Educação Física e Desportos.

Juventude e esplendor do Brasil — S. P. N.— Augusto de Castro.

Publicações periódicas

ALEMANHA

DEUTSCHE TECHNIK — Dezembro de 1942.
REVISTA SIEMENS — N.º 4 de 1942.

BRASIL

ENGENHARIA — N.º 1, Setembro de 1942.
REVISTA POLITÉCNICA — N.º 139 — Maio-Dezembro de 1941.

CHILE

REVISTA DE CAMINOS — Abril-Maio de 1942.

ESPANHA

CEMENTO — Novembro e Dezembro de 1942.
DYNA — Dezembro de 1942 e Janeiro de 1943.
REVISTA DE FORMACION Y DOCUMENTACION PROFESIONAL — Jan.º-Fev.º e Março-Abril de 1942.
REVISTA DE OBRAS PÚBLICAS — N.ºs 2730 a 2733.

FRANÇA

LA CHRONIQUE DES MINES COLONIALES — N.º 108 — Outubro de 1942.

HUNGRIA

TECHNIKA — Outubro de 1942.

ITÁLIA

ANNALI DEI LAVORI PUBLICI — Julho de 1942.
L'ELECTROTECNICA — N.º 17 de 1942.
L'ORGANIZAZIONE SCIENTIFICA DEL LAVORO — Dezembro de 1942.
RIVISTA DEL CATASTO E DEI SERVIZI TECNICI ERARIALI — Maio-Junho e Julho-Agôsto de 1942.

PORTUGAL

ARQUITECTURA PORTUGUESA E CERÂMICA E EDIFICAÇÃO — Outubro e Novembro de 1942.
AGROS — Novembro-Dezembro de 1942.
BOLETIM DA COMISSÃO DE FISCALIZAÇÃO DAS ÁGUAS DE LISBOA — N.º 21.
BOLETIM DA ORDEM DOS ENGENHEIROS — Setembro a Dezembro de 1942.
BOLETIM DA SOCIEDADE DE GEOGRAFIA DE LISBOA — Setembro-Outubro de 1942.
BOLETIM DA SOCIEDADE GEOLÓGICA DE PORTUGAL — Vol. I — Fasc. I, II e III.
BROTÉRIA — Dezembro de 1942 e Janeiro de 1943.
CLÍNICA HIGIÉNE E HIDROLOGIA — Nov.º de 1942.
ESTUDOS — Novembro e Dezembro de 1942.
GAZETA DOS CAMINHOS DE FERRO — N.ºs 1319 a 1322.
INDÚSTRIA PORTUGUESA — Dezembro de 1942.
JUNTA NACIONAL DA CORTIÇA — Outubro e Novembro de 1942.
MEDICINA VETERINÁRIA — Out.º-Dez.º de 1942.
NEPTUNO — Setembro-Outubro de 1942.
OCIDENTE — N.ºs 55 a 57.
PORTUCALE — Julho-Outubro de 1942.
REVISTA DE ARTILHARIA — Outubro de 1942.
SEARA NOVA — N.ºs 799 a 805.

SUÉCIA

ASEA-REVUE — Julho-Novembro de 1942.

EMULSÕES

de asfalto para estradas

Todos os tipos e percentagens

TELEFONE 20879
Telegramas: Epalda — LISBOA

FÁBRICA EM SACAVÈM

SOCIEDADE INDUSTRIAL METALURGICA

Responsabilidade Limitada
(REGISTADO)

SERRALHARIAS,
CALDEIRARIA,
FERRARIA,
FUNDIÇÕES

ESCRITÓRIO
Rua de S. Tiago, 13
LISBOA
Telefone 26572

Cimento «Liz» hidrofugado «N»

PRÓPRIO PARA
IMPERMEABILIZAÇÃO DE OBRAS
REBOCOS, FUNDAÇÕES, PAREDES, ETC.

Substitue com vantagem de ordem técnica e económica todos os impermeabilizadores conhecidos.

Em sacos de papel de 50 quilos

Peçam instruções para o seu emprêgo

Sede: Rua do Cais de Santarém, 64, 1.º — LISBOA
Filial: Rua de Santo António, 190-A, 1.º — PORTO

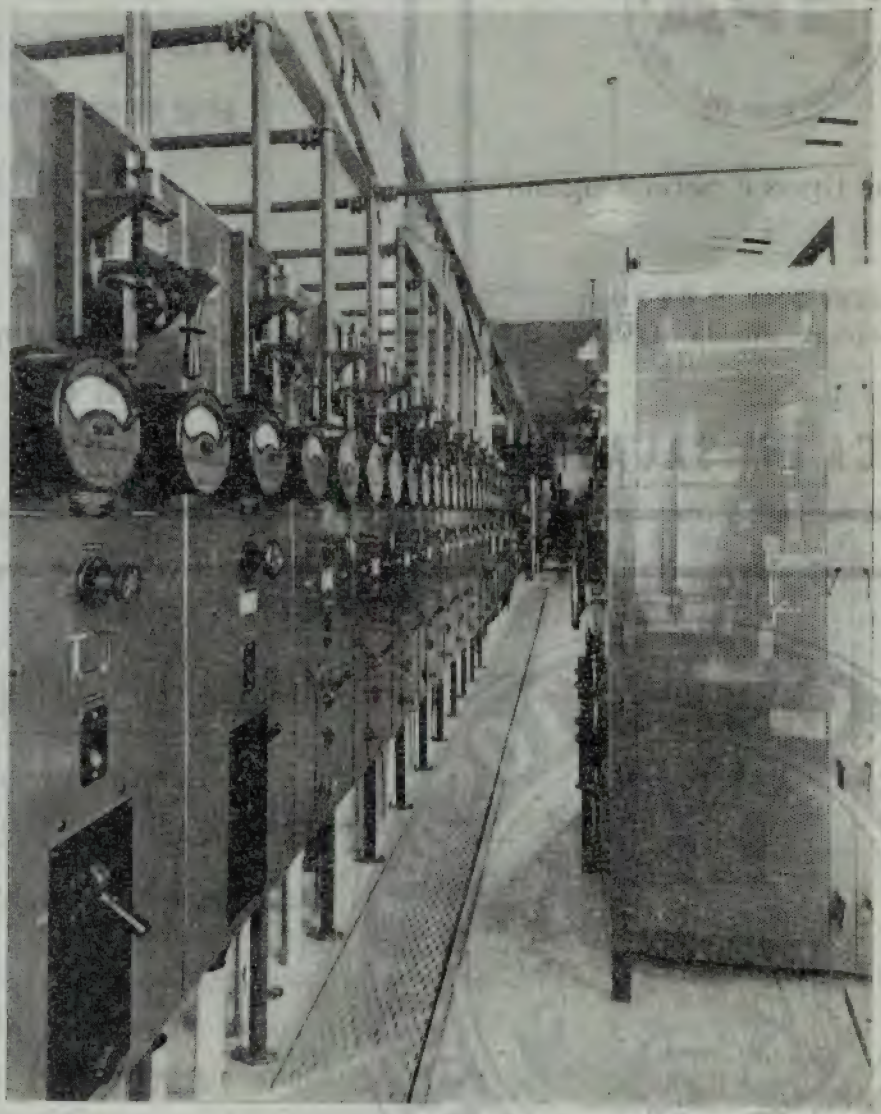
Agentes em todo o País

Standard Electrica

LISBOA

RADIO TELEFONES CABOS

Rua Augusta, 27 Telefones: 2 3111-2 3112-2 3113

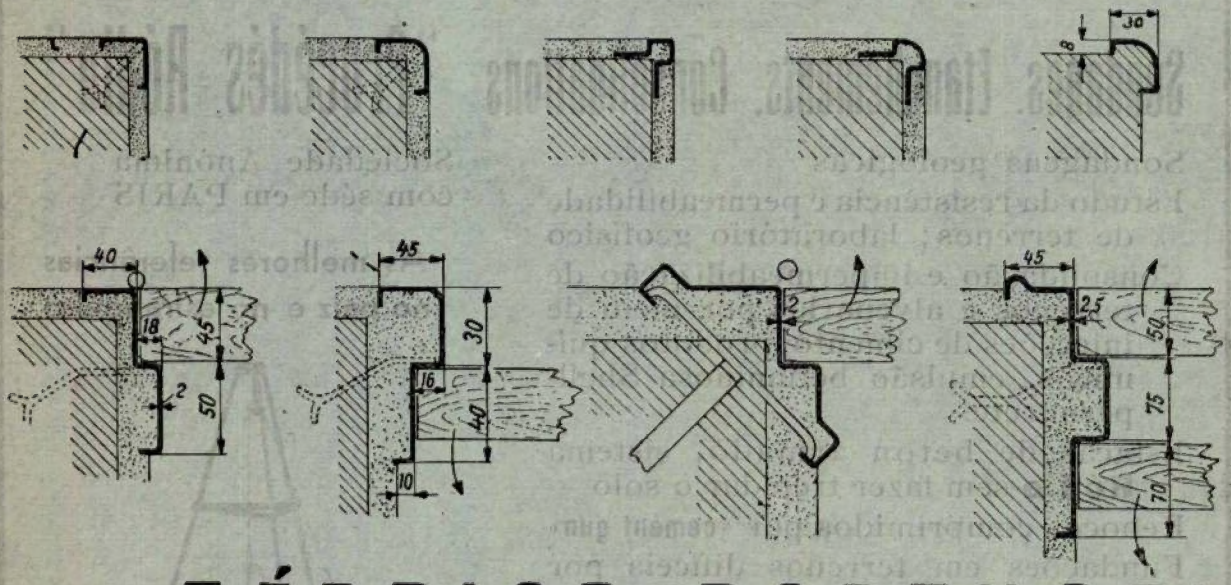


Quadro de contrôle dos geradores da Mackay
Rádio Station — Palo Alto — Califórnia

Uma instalação do Sistema

International Standard Electric Corporation

ALGUNS EXEMPLOS DOS PERFIS QUE SE PODEM REALIZAR



LISBOA **FÁBRICA PORTUGAL**

FABRICAÇAO DE PERFIS DE CHAPA PARA TODOS OS GENEROS DE TRABALHOS DE CONSTRUÇÃO CIVIL

UMA REVOLUÇÃO NA CONSTRUÇÃO CIVIL

Granulados de mármores

para exportação e para o país

Mosaicos de granulados de mármore

OS MAIS BONITOS
OS MAIS RESISTENTES
OS MAIS VANTAJOSOS

Soc. Portuguesa CADAN

Rua D. Estefania, 42

Telefone 47812 — Lisboa

FILIAL NO PÔRTO:

PRAÇA DA BATALHA, 90, 2.º

MEMORIAL DO ELECTRICISTA

Colecção de livros com dados técnicos, fórmulas, esquemas de ligação e instruções de montagem, úteis no exercício da profissão de electricista, coordenados pelo Engenheiro **Julião Senna.**

FOI POSTO À VENDA O TERCEIRO VOLUME SÔBRE:

ACUMULADORES

Ilustrado com numerosas gravuras e esquemas de ligação—Tabelas técnicas.

Preço de cada volume Esc. 10$00
Pelo correio mais Esc. 1$60

À VENDA NAS LIVRARIAS

Pedidos aos depositários:

LIVRARIA CLÁSSICA EDITORA

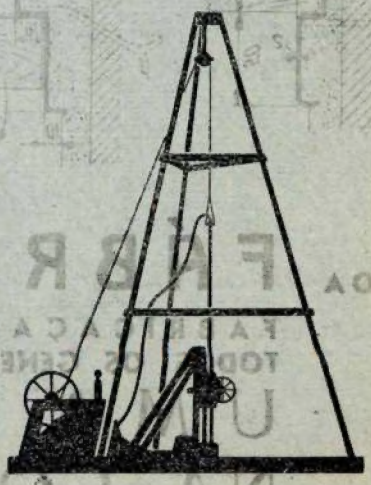
Praça dos Restauradores, 17 — Lisboa

Sondages. Etanchements. Consolidations "Procédés Ródio"

Sondagens geológicas
Estudo da resistência e permeabilidade de terrenos; laboratório geofísico
Consolidação e impermeabilização de terrenos e alvenarias por meio de injecções de cimento, produtos químicos, emulsão betuminosa Shellperm, etc.
Estacas de beton armado, sistema **Ródio** sem fazer trepidar o solo
Rebocos comprimidos por «**cement gun**»
Fundações em terrenos difíceis por congelação artificial, ou baixando o nível da água friática.

Sociedade Anónima com séde em PARIS

As melhores referências no paiz e no estrangeiro



Engenheiro delegado para Portugal

Walter Weyermann

P. do Município, 32-2.º--LISBOA Tel. 2 8685

EMPRÊSA DE SONDAGENS E FUNDAÇÕES, L.DA

COM

Eng. Ricardo E. Teixeira Duarte

(Um quarto de século de especialização técnica)

Sondagens geológicas

—

Poços artezianos

—

Rebaixamentos do nível freático

—

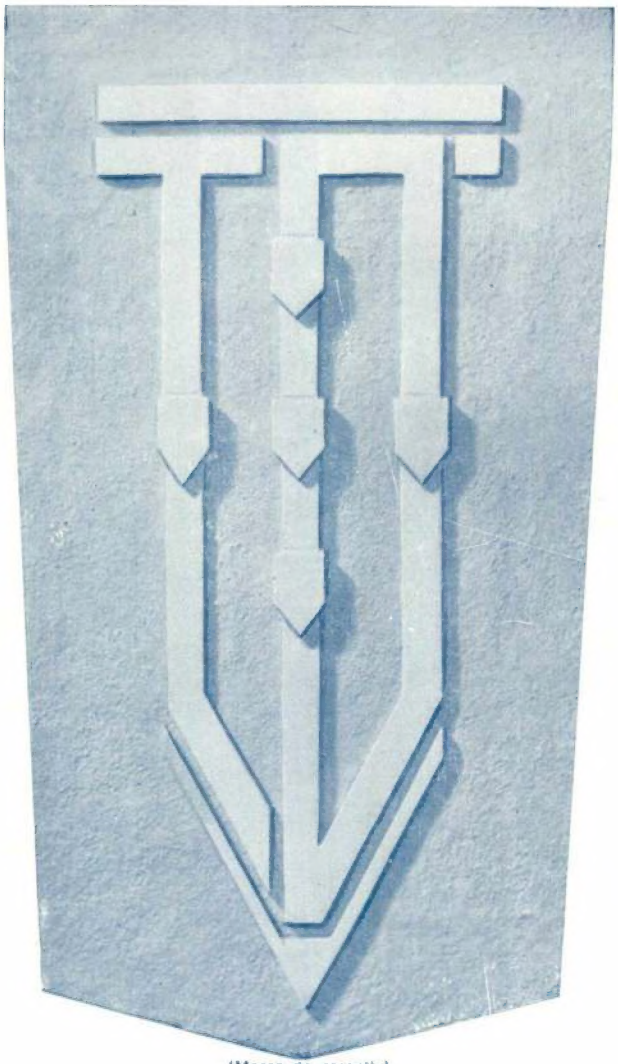
Consolidações do solo

—

Impermeabilização de rochas

—

Captações de água subterrânea



(Marca de garantia)

Fundações de todos os géneros

—

Alicerces económicos

—

Estacas de todos os tipos

—

Consolidação de más fundações

—

Obras hidráulicas

—

Obras subterrâneas

LISBOA — RUA AUGUSTA, 280, 3.º

TELEFONE 2 3962

SOCIEDADE ANÓNIMA

BROWN, BOVERI & CIE.

BADEN (SUISSA)

Representante geral para Portugal e Colónias:

EDOUARD DALPHIN

Escritório Técnico: Rua de Passos Manuel, 191, 2.º // PORTO // Tel. 2411

Máquinas eléctricas, transformadores, mutadores, aparelhos para alta e baixa tensão. Montagem completa de centrais termo e hidro-eléctricas. Electrificação de fábricas e de caminho de ferro. Locomotivas, e auto-motoras eléctricas e Diessel-eléctricas. Máquinas de extracção. Turbinas a vapor. Geradores de vapor Velox. Máquinas frigoríficas. Grupos e transformadores para a soldadura pelo arco. Fornos eléctricos. Comandos eléctricos especiais para tôdas as máquinas utilizadas nas Fábricas de Fiação, Tecelagem, Acabamentos, Estamparia, Cimento, Moagem, etc.

Barragem do Ermal, da Companhia Electro-Hidráulica de Portugal, com 20 milhões de metros cúbicos de capacidade da albufeira. Na parte central, duas comportas automáticas, da casa construtora «Ateliers des Charmilles», de 9 × 5 metros, para a evacuação das cheias. Em baixo, a central automática de Guilhofrei (I) com uma turbina vertical tipo Kaplan (Ateliers des Charmilles) de 2750 cavalos e o canal de condução da água à central do Ermal (central II) com uma turbina vertical tipo Francis de 6250 cavalos (Ateliers des Charmilles) e duas horizontais (Escher-Wyss) de 500 e 1500 cavalos. Tôda a parte eléctrica (alternadores, transformadores, aparelhos de 2000 e 30000 Volts) da casa BROWN, BOVERI & Cie.